



Universidade do Porto

Faculdade de Engenharia

FEUP

Transporte de Escalares Passivos em Escoamentos Turbulentos Sujeitos a Curvatura e Corte Uniforme

Delmar Ferreira Jorge
(Licenciado em Engenharia Mecânica)

Dissertação para a obtenção do grau de
Doutor em Engenharia Mecânica
pela Universidade do Porto

Julho de 2006

Transporte de Escalares Passivos em Escoamentos Turbulentos Sujeitos a Curvatura e Corte Uniforme

Delmar Ferreira Jorge

Resumo

O objectivo principal deste trabalho foi a simulação do transporte de escalares passivos em escoamentos turbulentos, através da simulação numérica directa (DNS–*Direct Numerical Simulation*) e da simulação das grandes escalas da turbulência (LES–*Large Eddy Simulation*), visando a simulação de escoamentos em geometrias complexas.

Utilizando a simulação numérica directa (DNS) simulámos o transporte de escalares passivos em turbulência isotrópica, forçada e em decaimento, e sujeita ao efeito de corte e gradiente vertical do campo escalar, com número de Reynolds baseado na microescala de Taylor (R_λ) de 40 e número de Prandtl (Pr) igual a 0.7 e 10. Os cálculos foram efectuados num cubo periódico com graus de distorção diversos para avaliar a capacidade dos métodos numéricos utilizados na resolução deste tipo de problemas. Os resultados obtidos mostraram que as distribuições estatísticas do campo escalar, derivadas da velocidade, correlações entre vorticidade e gradiente escalar e correlações entre taxas de deformação e gradiente escalar apresentam evoluções idênticas para qualquer dos graus de distorção da malha. Deste modo, concluímos que os métodos numéricos utilizados são adequados e o programa de cálculo pode ser usado na resolução de problemas de maior complexidade geométrica.

De seguida, estudámos os efeitos da curvatura e do corte na turbulência, por simulação do escoamento com corte no interior de um canal com curvatura e sem camada limite, com número de Reynolds baseado na semialtura do canal (Re_b) de 68000, do qual são conhecidos resultados experimentais de Holloway and Tavoularis (1992). Utilizámos a simulação das grandes escalas da turbulência (LES) e as tensões de *submalha* foram modeladas através do modelo dinâmico Lagrangeano. Nas fronteiras superior e inferior do canal utilizou-se a condição de escorregamento livre, na direcção transversal condições periódicas e na saída a condição convectiva, discretizada com recurso ao método de Euler explícito. Estudou-se a influência do tempo de integração, da malha e da condição de entrada. Foram testadas três condições de entrada distintas: (i) baseada em números aleatórios com distribuição Gaussiana; (ii) um campo com distribuição Gaussiana em que a correlação entre as componentes das tensões de Reynolds é especificada e (iii) obtida a partir de um campo desenvolvido numa simulação prévia usando um cubo de turbulência isotrópica. Concluímos que: as médias devem ser efectuadas entre o 6º e 12º segundos após o início do cálculo; a malha necessita de 64×64 nós na direcção transversal e a condição de entrada (iii) foi a mais adequada. Verificámos que: na zona recta do canal, as tensões de Reynolds aumentam

fruto de uma transferência de energia do campo médio para o campo turbulento por acção do corte e que na zona curva o crescimento das tensões de Reynolds é mais acentuado e é provocado pela curvatura.

Por último, simulou-se o escoamento turbulento no interior de um canal com dupla curvatura, com número de Reynolds baseado na semialtura do canal (Re_b) de 68000 e número de Prandtl (Pr) igual a 1, com corte e gradiente do escalar na direcção vertical. As simulações foram efectuadas usando a metodologia da simulação das grandes escalas da turbulência (LES), as tensões de *submalha* foram modeladas através do modelo dinâmico Lagrangeano e os resultados foram validados pelos resultados experimentais de Chebbi et al. (1998). Considerámos 18 intensidades de corte ($S \in [-0.1560; 0.044]$) e do gradiente escalar ($s \in [-1.557; 0.445]$) e vários canais com raios de curvatura R_c iguais a 1, 2 e 3.5 metros. A condição de entrada para os campos de velocidade e escalar foi obtida numa simulação prévia de um escoamento com corte e gradiente escalar na direcção vertical, usando a simulação numérica directa (DNS). Verificámos que os resultados numéricos e experimentais apresentam discordâncias pontuais da ordem dos 30%, cuja origem atribuímos (i) à condição de entrada do trabalho numérico e (ii) ao desenvolvimento da camada limite nas secções curvas do trabalho experimental. Foram analisadas as tensões de Reynolds e a sua anisotropia, a anisotropia das tensões principais e os fluxos e a variância escalares, para concluirmos que: a curvatura e contra-curvatura e a sua intensidade, bem como a intensidade do corte e do gradiente vertical do campo escalar, promovem o aumento da intensidade da turbulência quando o corte e a curvatura são negativos e diminuem a sua intensidade quando o corte e a curvatura são positivos.

Abstract

The main purpose of this work was the simulation of passive scalars transport in turbulent flows, by direct numerical simulation (DNS) and the large eddy simulation (LES) of turbulence, with the ultimate objective of simulating flows in complex geometries.

Using a direct numerical simulation (DNS), we simulated the passive scalar transport in forcing and decaying isotropic turbulence, and with shear and vertical gradient of the scalar field, with a Reynolds number based on the Taylor microscale (R_λ) of 40 and a Prandtl number (Pr) equal to 0.7 and 10. The calculations were performed in a periodical cube with several distortion degrees to evaluate the capacity of the numerical methods being used for solving these problems. The results showed that statistical distributions of the scalar field, velocity derivatives, vorticity and scalar gradient correlations and rate of strain and scalar gradient correlations are identical for any distortion mesh. We concluded that the numerical methods used are appropriate and the computer code can be used in more complex geometries.

The effects of curvature and shear in turbulence were also studied, by simulating a uniformly sheared flow along a single curved duct without boundary layer, with a Reynolds number based on half-height of the channel (Re_b) of 68000. This was based on the experimental results by Holloway and Tavoularis (1992). We used the large eddy simulation of turbulence (LES) and the *subgrid* stresses were modeled through the Lagrangian dynamic model. In the upper and lower boundary of the channel we used a free slip condition, periodic boundary conditions in the spanwise direction and in the outlet we used a convective condition, discretized by the explicit Euler method. We studied the influence of the integration time, mesh and inlet condition. Three different inlet conditions were tested: (i) based on random numbers with Gaussian distribution; (ii) a field with Gaussian distribution in which the correlation between the components of the Reynolds stresses is specified and (iii) obtained from a field developed in a previous simulation using an isotropic turbulent cube. We concluded that: the averages should be made between 6th and 12nd seconds after the beginning of calculation; the mesh needs 64×64 nodes in the spanwise direction and the inlet condition (iii) was the most appropriate. We verified that: in the straight region of the channel, Reynolds stresses increase due to a energy transfer of the mean field to the turbulent field by action of the shear and in the curved region the growth of the Reynolds stresses is more accentuated and due to the curvature.

Finally, the turbulent flow inside a channel with shear and curvature was simulated, with Reynolds number based on half-height of the channel (Re_b) of 68000 and Prandtl number (Pr) equal to 1, with shear and scalar gradient in the vertical direction. The simulations were performed using the large eddy simulation of turbulence (LES), the *subgrid* stresses were modeled using the Lagrangian dynamic model and the results were validated by experimental results of Chebbi et al. (1998). We considered 18 shear intensities ($S \in [-0.1560; 0.044]$) and scalar gradient ($s \in [-1.557; 0.445]$) and several channels with radius of curvature R_c equal to 1, 2 e 3.5 meters. The inlet condition for velocity and scalar fields were obtained in a previous simulation of a flow with shear and scalar gradient in the vertical direction, using the direct numerical simulation (DNS). We verified that the numeric and experimental results present differ in about 30%, which origin is attributed (i) to the inlet condition of the numeric work and (ii) to the development of the boundary layer in the curved sections of the experimental work. Analyzing Reynolds stresses and its anisotropy, the anisotropy of the principal stresses and the scalar fluxes and scalar variance, we concluded that: the curvature and counter curvature and its intensity, as well as the intensity of shear and scalar vertical gradient, promote the increase of turbulence intensity when the shear and curvature are negative and reduce its intensity when the shear and curvature are positive.

Résumé

L'objectif principal de ce travail porte sur l'étude du transport de grandeurs scalaires passives dans des écoulements turbulents, au travers de la simulation numérique directe (DNS–*Direct Numerical Simulation*) et de la simulation des grandes échelles de la turbulence (LES–*Large Eddy Simulation*), avec comme perspective la simulation des écoulements dans des géométries complexes.

Par simulation numérique directe (DNS) nous avons étudié le transport de grandeurs scalaires passives en turbulence isotropique, forcée et en décroissance, soumise à une coupure verticale des gradients du champ des grandeurs scalaires, et avec un nombre de Reynolds (R_λ) de 40 correspondant à la micro-échelle de Taylor et un nombre de Prandtl (Pr) égal à 0.7 ou à 10. Les calculs ont été effectués dans un cube périodique avec des degrés de déformation divers pour évaluer la capacité des méthodes numériques utilisées dans la simulation de tels problèmes. Les résultats obtenus ont prouvé que les distributions statistiques du champ des grandeurs scalaires, des dérivées de la vitesse, des corrélations entre la vorticit  et le gradients des grandeurs scalaires, ainsi que les corrélations entre les taux de déformation et ces m mes gradients, pr sentent des  volutions identiques quels que soient les degr s de d formation du maillage. Ainsi, nous pouvons en d duire que les m thodes numériques utilis es sont adapt es   ce type de simulation et que le programme de calcul peut  tre utilis  pour la r solution de probl mes de complexit  g om trique plus grande.

Nous avons  tudi  ensuite les effets de courbure et de coupure dans la turbulence, dans le cadre de la simulation d'un  coulement avec coupure   l'int rieur d'un canal courb  et sans couche limite, avec un nombre de Reynolds bas  sur la demi-hauteur du canal (Re_b) de 68000, et pour lequel nous avons aussi   notre disposition les r sultats exp rimentaux de Holloway and Tavoularis (1992). Nous avons exploit  la simulation des grandes  chelles de la turbulence (LES) et les tensions de *sous-maille* ont  t  mod l es   l'aide du mod le dynamique Lagrangien. Dans les fronti res sup rieures et inf rieures du canal, nous avons employ  une condition de glissement libre, dans la direction transversale, des conditions p riodiques, et   la sortie, une condition convective, avec une discr tisation de type "Euler explicite". Nous avons  tudi  l'influence du temps d'int gration, du maillage et de la condition d'entr e. Trois conditions d'entr e distinctes ont  t  exp riment es : (i) bas e sur des nombres al atoires avec distribution Gaussienne (ii) un champ avec distribution Gaussienne dans laquelle la corr lation entre les composantes des tensions de Reynolds est

spécifiée et (iii) obtenue à partir d'un champ instantané dans une simulation préalable en utilisant un cube de turbulence isotropique. Les conclusions sont que : les moyennes doivent être effectuées entre les 6ème et 12èmes secondes après le début du calcul ; le maillage a besoin de 64×64 nœuds dans la direction transversale, et la condition d'entrée (iii) est la plus adaptée. Nous avons vérifié aussi que, dans la partie droite du canal, les tensions de Reynolds augmentent du fait d'un transfert d'énergie du champ moyen vers le champ turbulent par action de la coupure, et que dans la zone courbe, la croissance des tensions de Reynolds est plus accentuée du fait de la courbure.

Finalement, nous avons réalisé la simulation d'un écoulement turbulent à l'intérieur d'un canal avec double courbure, avec un nombre de Reynolds basé sur la demi-hauteur du canal (Re_b) de 68000, et un nombre de Prandtl (Pr) égal à 1, avec coupure et gradients des grandeurs scalaires dans la direction verticale. Les simulations ont été faites en utilisant la méthode de la simulation des grandes échelles de la turbulence (LES), les tensions de *sous-maille* ont été formulées à l'aide du modèle dynamique Lagrangien, et les résultats ont été validés par les résultats expérimentaux de Chebbi et al. (1998). Nous avons considéré 18 intensités de coupure ($S \in [-0.1560; 0.044]$) et du gradient des grandeurs scalaires, et différentes formes de canal avec des rayons de courbure égaux à 1, 2 et 3.5 mètres. La condition d'entrée pour les champs de vitesse et des grandeurs scalaires a été obtenue à partir de la simulation préalable d'un écoulement avec coupure et gradient des grandeurs scalaires dans la direction verticale, en utilisant la simulation numérique directe (DNS). Nous avons vérifié que les résultats numériques et expérimentaux présentent des discordances ponctuelles de l'ordre de 30%, dont l'origine peut être attribuée (i) à la condition d'entrée dans la numérisation et (ii) au développement de la couche limite dans les sections courbes des divers tests expérimentaux. Nous avons analysé les tensions de Reynolds ainsi que l'anisotropie associée, l'anisotropie des tensions principales, et le flux et la variance des grandeurs scalaires ; les conclusions sont que : la courbure et la contre-courbure et son intensité, ainsi que l'intensité de la coupure et le gradient vertical du champ des grandeurs scalaires, provoquent l'augmentation de l'intensité de la turbulence quand la coupure et la courbure sont négatives, et diminuent cette intensité quand la coupure et la courbure sont positives.

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. José Manuel Laginha Mestre da Palma a confiança que depositou em mim, propondo-me este trabalho, e a disponibilidade que sempre teve na sua orientação. Agradeço também ao Doutor Alexandre Silva Lopes pelo tempo disponibilizado e por todas as suas sugestões que contribuíram para valorizar este trabalho.

Agradeço também a todos os amigos e colegas que me apoiaram no desenvolvimento deste trabalho e aos meus pais, meus irmãos e tios Fernando e Paulina por tudo o que fazem por mim.

Esta tese foi realizada no âmbito da bolsa de doutoramento SFRH/BD/4657/2001, concedida pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia - FCT, a quem agradeço todo o apoio prestado.

*Aos meus pais e irmãos,
pelo apoio que me dão.*

Conteúdo

Resumo	i
Abstract	iii
Résumé	v
Agradecimentos	vii
Nomenclatura	xxi
1 Introdução	1
1.1 Revisão de Trabalhos Anteriores	1
1.2 Objectivos e Contribuição	7
1.3 Conteúdo da Tese	8
2 Modelos Matemáticos e Técnicas Numéricas	11
2.1 Introdução	11
2.2 Equações Fundamentais	12
2.2.1 Simulação Numérica Directa (DNS)	13
2.2.2 Simulação das Grandes Escalas da Turbulência (LES)	14
2.3 Técnicas Numéricas	18
2.3.1 Discretização da Equação de Transporte Escalar	19
2.3.2 Discretização das Equações de Continuidade e de Navier-Stokes	22
2.3.3 Discretização dos Termos de Corte	25
2.3.4 O Termo de Força	26
3 Transporte de Escalares Passivos em Turbulência Forçada e com Corte	29
3.1 Introdução	30
3.2 Modelo Matemático	31
3.2.1 Domínio de Cálculo	32
3.2.2 Campos Iniciais e Condições de Fronteira	33
3.3 Escalares Passivos em Turbulência Forçada: Análise dos Resultados	34
3.3.1 Energia Cinética da Turbulência e Variância Escalar	35
3.3.2 Momentos Estatísticos de Terceira e Quarta Ordem	36

3.3.3	Isotropia dos Campos	39
3.3.4	Funções Densidade de Probabilidade	40
3.3.5	Correlações entre Gradiente Escalar, Vorticidade e Taxas de De- formação	41
3.4	Escalares Passivos com Corte e Estratificação Escalar: Análise dos Resultados	43
3.4.1	Energia Cinética da Turbulência e Variância Escalar	44
3.4.2	Campo de Velocidade no Plano de Corte	45
3.4.3	Campo Escalar no Plano de Corte	46
3.4.4	Fluxos Escalares	46
3.4.5	Momentos Estatísticos	47
3.4.6	Funções Densidade de Probabilidade	49
3.5	Conclusões	50
4	Escoamento Turbulento num Canal com Curvatura e Corte	51
4.1	Introdução	52
4.2	Modelo Matemático e Técnicas Numéricas	53
4.2.1	Domínio de Cálculo e Condições de Fronteira	53
4.3	Análise dos Resultados	55
4.3.1	Período Usado para o Cálculo das Médias	55
4.3.2	Influência da Malha nos Resultados	56
4.3.3	A Resposta da Condição de Entrada	57
4.3.4	O Efeito da Curvatura e do Corte na Turbulência	59
4.4	Conclusões	64
5	Escoamento Turbulento com Corte num Canal com Dupla Curvatura	67
5.1	Introdução	68
5.2	Modelo Matemático e Técnicas Numéricas	69
5.2.1	Domínio de Cálculo e Condições de Fronteira	69
5.2.2	Geração da Condição de Entrada	70
5.2.3	Condições de Teste das Simulações	71
5.3	Análise dos Resultados	72
5.3.1	Efeitos da Curvatura e Contra-Curvatura na Turbulência	74
5.3.2	Efeitos da Intensidade da Curvatura na Turbulência	79
5.3.3	Efeitos da Intensidade do Corte e do Gradiente Escalar na Turbulência	84
5.4	Conclusões	91
6	Conclusões e Trabalho Futuro	93
6.1	Conclusões	93
6.2	Trabalho Futuro	95
A	Condição de Saída na Simulação das Grandes Escalas da Turbulência	97
A.1	Introdução	98
A.2	Descrição Matemática	99

A.2.1	Modelo Matemático	99
A.2.2	Domínio de Cálculo e Malha	99
A.2.3	Condição Inicial	100
A.2.4	Condições de Fronteira	100
A.3	Análise dos Resultados	101
A.3.1	Determinação Local da Velocidade de Convecção na Saída	101
A.3.2	Diagramas de Estabilidade pelo Método de von Neumann	104
A.3.3	Condição de Gradiente Longitudinal Nulo e de Euler Explícito	106
A.4	Conclusões	109
B	Derivação e Adimensionalização dos Termos de Corte	111
B.1	Derivação dos Termos de Corte	111
B.2	Adimensionalização dos Termos de Corte	113

Lista de Figuras

1.1	Representação esquemática do corte positivo (estável) e negativo (instável).	4
2.1	Volume de controlo bidimensional e notação usada para designar as suas faces e os volumes de controlo vizinhos.	18
3.1	Domínio físico, inclinado a 30° entre as direcções z and ζ	32
3.2	Perfis do campo médio de velocidade e escalar.	33
3.3	Evolução temporal da energia cinética da turbulência e da variância escalar em turbulência forçada.	36
3.4	<i>Skewness</i> das derivadas longitudinais da velocidade, do campo escalar e das derivadas mistas.	37
3.5	<i>Flatness</i> das derivadas longitudinais da velocidade, do campo escalar e das derivadas mistas.	39
3.6	PDF normalizadas do campo das derivadas da velocidade longitudinal e transversal, no instante $t=0$ s.	40
3.7	PDF normalizadas do campo escalar nos instantes $t=0$ s e $t=0.8$ s.	41
3.8	Correlações entre gradiente escalar e vorticidade; correlações entre gradiente escalar e taxas de deformação.	42
3.9	Iso-superfícies 3D do gradiente escalar com a vorticidade e do gradiente escalar com as taxas de deformação.	43
3.10	Energia cinética da turbulência e variância escalar perante o corte.	44
3.11	Campo de velocidade em malhas ortogonais nos instantes $t = 0.2$ s, $t = 0.4$ s, $t = 0.6$ s e $t = 0.8$ s.	45
3.12	Campo escalar em malhas ortogonais nos instantes $t = 0.2$ s, $t = 0.4$ s, $t = 0.6$ s e $t = 0.8$ s.	47
3.13	Evolução temporal dos fluxos escalares $\overline{u_i \phi}$ para α igual a 0° , 15° , 30° e 45°	48
3.14	<i>Skewness</i> das derivadas longitudinais da velocidade; escala integral adimensionalizada pelo valor inicial.	48
3.15	Evolução temporal das <i>flatness</i> das derivadas longitudinais da velocidade e do campo escalar.	49
3.16	PDF normalizadas do campo escalar e do campo de pressão, no instante $t = 0.8$ s.	49

4.1	Geometria do canal com curvatura, com secção de entrada, curva e secção de saída.	54
4.2	Valor <i>r.m.s</i> da velocidade usando diferentes tempos de início das médias e fazendo médias durante intervalos de tempo diferentes.	55
4.3	Valor <i>r.m.s</i> da velocidade para diferentes malhas e tensão de Reynolds para duas condições de entrada.	57
4.4	Representação esquemática do campo de corte médio com curvatura. . . .	58
4.5	Tensões de Reynolds $u_i u_j$ e o dobro da energia cinética, $q^2 = 2k$	61
4.6	Velocidade média axial e vertical ao longo do eixo do canal.	62
4.7	Coefficiente de pressão nas paredes do canal.	62
4.8	Energia cinética da turbulência e tensão de corte em diversas secções: início da curva; meio da curva e final da curva.	63
5.1	Geometria do canal em S, com secção de entrada, curva e contracurva e secção de saída.	70
5.2	Perfil médio da velocidade e gradiente vertical escalar perante corte e gradiente escalar positivo ($S > 0$ e $s_\phi > 0$) e negativo ($S < 0$ e $s_\phi < 0$).	71
5.3	Evolução das tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ ao longo da linha de eixo do canal de raio $Rc = 3.5$ m para a situação de corte negativo à entrada.	75
5.4	Evolução das tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ ao longo da linha de eixo do canal de raio $Rc = 3.5$ m para a situação de corte positivo à entrada.	77
5.5	Evolução da energia cinética da turbulência $\overline{q^2}$ ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m para corte negativo e positivo à entrada.	79
5.6	Evolução das tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura, considerando as configurações NEA e PEA.	80
5.7	Evolução da energia cinética da turbulência $\overline{q^2}$ ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura, considerando as configurações NEA e PEA.	80
5.8	Evolução do tensor anisotrópico m_{ij} ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura, considerando as configurações NEA e PEA.	81
5.9	Evolução da anisotropia das tensões principais m_i e da anisotropia escalar m^2 ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura das secções curvas, considerando as configurações NEA e PEA.	82
5.10	Evolução da variância escalar $\overline{\phi^2}$ e dos fluxos escalares $\overline{u_i \phi}$ ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura, considerando as configurações NEA e PEA.	83
5.11	Evolução do ângulo da direcção principal máxima α_1 com a direcção s ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura, considerando as configurações NEA e PEA.	84
5.12	Evolução das tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m.	85
5.13	Evolução da energia cinética da turbulência $\overline{q^2}$ ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m para corte negativo e para corte positivo à entrada.	85

5.14	Evolução do tensor anisotrópico m_{ij} ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m.	86
5.15	Evolução da anisotropia das tensões principais m_i e da anisotropia escalar m^2 ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m.	87
5.16	Evolução da variância escalar $\overline{\phi^2}$ e dos fluxos escalares $\overline{u_i\phi}$ ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m.	88
5.17	Evolução do ângulo da direcção principal máxima α_1 com a direcção s ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m.	89
5.18	Campo médio escalar em planos perpendiculares ao eixo y , $Rc = 3.5$ m para $n/h_{in} = -1$, $n/h_{in} = -1/6$, $n/h_{in} = 1/6$ e $n/h_{in} = 1$	89
5.19	Campo médio escalar em planos perpendiculares a z , $Rc = 3.5$ m.	90
5.20	Campo médio de velocidade U no plano $z = 0$, $Rc = 3.5$ m.	90
A.1	Geometria do canal com curvatura e do canal em S	99
A.2	Componentes u e v da velocidade ao longo do eixo do canal com curvatura para diversas cotas y , usando a condição-A na saída, no instante $t = 0.07$ s.	102
A.3	Componentes u e v da velocidade ao longo do eixo do canal com curvatura para diversas cotas y , usando a condição-B na saída, no instante $t = 1$ s.	103
A.4	Crítérios de estabilidade S_j nas direcções computacionais ξ e η , usando a condição-A na saída, no instante $t = 0.07$ s.	103
A.5	Crítérios de estabilidade C_j nas direcções computacionais ξ e η , usando a condição-A na saída, no instante $t = 0.07$ s.	104
A.6	Diagramas de estabilidade para os diversos esquemas de discretização.	105
A.7	Componentes u e v da velocidade ao longo do eixo do canal a diversas cotas y , usando a condição-C na saída.	107
A.8	Componentes u e v da velocidade ao longo do eixo do canal a diversas cotas y , usando a condição-D na saída.	107
A.9	Transporte de uma onda (da esquerda para a direita), com difusão numérica e saída instável/estável.	108
A.10	Transporte de uma onda (da esquerda para a direita), sem difusão numérica e saída estável.	108

Lista de Tabelas

3.1	Isotropia dos campos no instante $t = 0$ s.	35
3.2	Isotropia dos campos no instante $t = 0.8$ s.	40
4.1	Condições de teste para estudar o efeito do instante de início e final no cálculo das médias.	56
4.2	Condições de teste para estudar o efeito do refinamento da malha nos resultados.	58
4.3	Detalhes do escoamento turbulento no interior do canal com curvatura. . .	60
5.1	Correlações prescritas para os campos iniciais da simulação que gerou a condição de entrada.	70
5.2	Estatísticas do campo de velocidade medidas por Chebbi et al. (1998) na entrada do canal em S.	71
5.3	Estatísticas dos campos usados na entrada do canal em S calculadas usando 0.2 s de tempo de integração.	72
5.4	Condições de teste usadas nas simulações LES no canal com $R_c = 1$ m incluindo os parâmetros adimensionais que contabilizam o efeito da curvatura, do corte médio e do gradiente vertical escalar.	73
5.5	Condições de teste usadas nas simulações LES no canal com $R_c = 2$ m incluindo os parâmetros adimensionais que contabilizam o efeito da curvatura, do corte médio e do gradiente vertical escalar.	74
5.6	Condições de teste usadas nas simulações LES no canal com $R_c = 3.5$ m incluindo os parâmetros adimensionais que contabilizam o efeito da curvatura, do corte médio e do gradiente vertical escalar.	76
A.1	Valores máximos dos critérios de estabilidade na saída.	104
A.2	Factores de amplificação para a equação da convecção usando a análise de von-Neumann.	106
A.3	Condições de teste da condição de convecção-difusão uni-dimensional. . . .	106

Nomenclatura

Caracteres Romanos

a_c	aceleração centrípeta
B_{ij}	co-factores da matriz de transformação de coordenadas
C	número de Courant
C_s	coeficiente de Smagorinsky
C_p	coeficiente de pressão
C_j	critério de estabilidade para a convecção
C_ϕ	velocidade de convecção
E	energia cinética da turbulência
e_{ij}	taxas de deformação
F	<i>flatness</i> -coeficiente de achatamento
\mathbf{f}	vector força, turbulência forçada
f_k	componentes do vector força
F^c	fluxo convectivo
F^d	fluxo difusivo
G	função filtro
h_{in}	semialtura do canal
J	determinante Jacobiano da matriz de transformação de coordenadas
k	número de onda; energia cinética da turbulência; intensidade da curvatura
\mathbf{k}	vector número de onda

k_i	componentes do vector número de onda
k_F	número da onda máximo associado à força \mathbf{f}
k_p	número de onda para o qual é máxima a energia cinética da turbulência
\mathcal{L}	tensões turbulentas resolvidas
L	aresta do domínio de cálculo
\dot{m}	caudal mássico
m_i	número inteiro arbitrário
$m_{1,2,3}$	anisotropia das tensões principais
m_{ij}	anisotropia das tensões de Reynolds
m^2	anisotropia escalar
n	coordenada local, medida sobre um eixo normal a uma dada superfície; plano na saída do canal
N_k	números de modos de Fourier para a força
\mathbf{n}	vector normal a uma dada superfície
Pr	número de Prandtl
$P_{i\phi}$	correlações pressão-escalar
P	termo de produção de energia cinética turbulenta
p	pressão
q^2	energia cinética turbulenta por unidade de massa
R_c	raio de curvatura do canal
Re_λ	número de Reynolds baseado na microescala de Taylor
Re_b	número de Reynolds baseado na semialtura do canal
Ri	número de Richardson
S	<i>skewness</i> -coeficiente de assimetria; superfície; número de corte adimensional
S_j	critério de estabilidade para a difusão
S_{ij}	tensor resolvido das taxas de deformação
s	coordenada local medida na direcção do escoamento

s_ϕ	gradiente vertical do campo escalar adimensional
T_{ij}	tensões de <i>submalha</i> filtradas usando o filtro temporal
t	tempo
U_c	velocidade de um escoamento a meia altura do canal
$\overline{U}, \overline{V}, \overline{W}, \overline{U}_i$	componente média da velocidade num referencial Cartesiano
u, v, w, u_i	componentes do vector velocidade num referencial Cartesiano
u'	intensidade da turbulência
\mathbf{v}_k	soma das componentes do vector velocidade nos números de onda k
V	volume; volume de controlo
\mathbf{v}	vector velocidade
x, y, z, x_i, x_j	coordenadas num referencial Cartesiano

Caracteres Gregos

α	ângulo; ângulo entre as direcções z e ζ
$\alpha_{1,2,3}$	direcções principais
β	matriz de mudança de coordenadas
β^{ij}	componentes da matriz de mudança de coordenadas
Γ	difusividade turbulenta
Δt	passo temporal
$\Delta x, \Delta y$ e Δz	espaçamento da malha num referencial Cartesiano
$\overline{\Delta}$	largura do filtro de LES
ϵ_{ij}	taxas de dissipação das tensões de Reynolds
$\epsilon_{i\phi}$	taxas de dissipação dos fluxos escalares
$\epsilon_{\phi\phi}$	taxas de dissipação da variância escalar
ε, ϵ	taxa de dissipação da energia cinética da turbulência
θ	ângulo entre o vector velocidade e o eixo dos xx
λ	coeficiente de interpolação linear; microescala de Taylor

μ_{sgs}	viscosidade turbulenta de <i>submalha</i> dinâmica
μ_{mol}	viscosidade molecular dinâmica
μ_{eff}	viscosidade efectiva dinâmica
ν	viscosidade molecular cinemática
ν_T	viscosidade turbulenta
ξ, η, ζ, ξ_i	coordenadas num sistema de coordenadas genérico
ρ	massa volúmica
τ	parâmetro usado para adimensionalizar o eixo dos xx ; escala temporal
τ_{ij}	componentes do tensor das tensões viscosas; tensões de <i>submalha</i>
τ_0	valor de τ na entrada da curva
ϕ	escalar passivo; variável genérica
ϕ_0	função transportada usando a equação da convecção-difusão
ω	módulo do vector vorticidade

Índices e Expoentes

P, E, W, etc.	referentes ao centro de um volume de controlo
e, w, etc.	referentes a uma face de um volume de controlo
w	refere-se a parede
ref	valor considerado como referência
inst	valor instantâneo

Operadores

$(\overline{\quad})$	média temporal
$\langle (\quad) \rangle$	média de fase
$\nabla(\quad)$	gradiente

Abreviaturas

BDS	<i>Backward Differencing Schemes</i>
CDS	<i>Central Differencing Scheme</i>
CeSA	<i>Centro de Estudos de Energia Eólica e Escoamentos Atmosféricos</i>
CFL	<i>Courant-Friedrichs-Lewy</i>
FFT	<i>Fast Fourier Transform</i>
SGS	<i>Sub Grid Stresses</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
PDF	<i>Probability Density Function</i>
RaNS	<i>Reynolds averaged Navier-Stokes</i>
r.m.s	<i>root mean square</i>

Capítulo 1

Introdução

1.1 Revisão de Trabalhos Anteriores

A Importância da Simulação do Transporte de Escalares Passivos

A designação escalar passivo (por oposição a escalar activo) inclui qualquer quantidade escalar ϕ que não influencie o transporte de quantidade de movimento. Exemplos de escalares passivos podem ser a temperatura ou a concentração de um elemento químico. No entanto, se alguma das propriedades físicas do fluido (densidade ou viscosidade) for modificada devido a reacções químicas ou a variações de temperatura, os mesmos escalares (temperatura ou concentração) são considerados activos.

A capacidade de efectuar a simulação computacional do transporte de escalares passivos é de importância primordial em todas as situações que envolvam transporte turbulento, como por exemplo, sistemas de combustão que não sejam dominados pela cinética química ou fenómenos de difusão atmosférica turbulenta (Ecke, 2005). A simulação do transporte de escalares passivos coloca exigências e dificuldades acrescidas tanto do ponto de vista da modelação numérica como física. Muitas vezes trata-se de propriedades definidas positivas, com valores físicos válidos dentro de um intervalo bem definido (por exemplo, valores entre 0 e 1) e onde os fenómenos físicos pertinentes podem ocorrer a escalas características diferentes daquelas associadas ao transporte de quantidade de movimento. Em regra, os escoamentos turbulentos que envolvem o transporte de quantidades escalares são problemas complexos, com estruturas que abrangem uma gama larga de escalas temporais e espaciais (Shraiman and Siggia, 2000), onde as teorias clássicas de isotropia local de Kolmogorov já conhecidas para a velocidade têm sido colocadas em causa quando são aplicadas a campos escalares, como se verifica no trabalho realizado por Warhaft (2000).

O Papel do DNS no Estudo de Escalares Passivos

A simulação numérica directa (DNS—*Direct Numerical Simulation*) tem sido a metodologia eleita para o estudo deste tipo de problemas, porque não recorre a qualquer modelação física. O trabalho de Orszag and Patterson (1972) é considerado o primeiro trabalho que usa DNS para estudar o decaimento da turbulência isotrópica. Siggia (1981) estudou a turbulência forçada e identificou a existência de tubos de vorticidade. Usando correlações de ordem elevada, Kerr (1985) observou o alinhamento entre as taxas de deformação e os tubos de vorticidade. Em estudos posteriores (e.g., Kerr, 1985; Warhaft, 2000; Shraiman and Siggia, 2000) questiona-se a interpretação dos mecanismos de mistura turbulenta, alicerçada na analogia entre os mecanismos de transporte de quantidade de movimento e quantidades escalares (analogia de Reynolds) e nos conceitos de isotropia das pequenas escalas e do equilíbrio de produção e dissipação de energia cinética da turbulência das teorias de Kolmogorov.

A necessidade de resolver a camada limite atmosférica motivou o trabalho de Schumann et al. (1986), no qual se usa a simulação numérica directa (DNS) num cubo, para estudar o efeito do corte e da estratificação estável na turbulência a baixos números de Reynolds. O trabalho permitiu concluir que as forças de volume provocadas pelo corte e estratificação contribuem para produzir energia cinética turbulenta, alongando as estruturas segundo uma direcção que forma 45° em relação à direcção do corte. O estudo foi alargado a números de Reynolds médios por Gerz et al. (1989), o que permitiu observar a existência de ondas gravíticas internas que se opõem ao fluxo de calor provocado pelo gradiente de temperatura na direcção vertical, existindo uma gama de números de Richardson ($R_i = 0.5 - 1$) para os quais o escoamento permanece estável considerando um dado número de Prandtl ($Pr = 5$). O programa de cálculo usado por Gerz et al. (1989) foi adaptado por Kaltenbach et al. (1991) para estudar escoamentos com estratificação moderada, nos quais existe um gradiente vertical de velocidade e temperatura e três gradientes escalares, um em cada direcção física.

O Estudo de Escoamentos com Curvatura e Corte pela Via Experimental

Todos os escoamentos turbulentos apresentam linhas de corrente instantâneas com curvatura acentuada. Segundo Holloway and Tavoularis (1992), no caso de escoamentos com corte, também as linhas de corrente médias apresentam curvatura. O conhecimento da interacção da curvatura das linhas de corrente e do corte, pode permitir reduzir a resistência aerodinâmica constituindo uma ferramenta importante no desenvolvimento de veículos (e.g., automóveis, aviões e barcos) mais eficientes e com melhores prestações. O estudo de escoamentos turbulentos com curvatura e corte tem-se restringido à experimentação. Vários trabalhos de natureza experimental foram realizados e publicados durante a década de setenta e oitenta. Champagne et al. (1970) utilizando um canal plano, estudaram a homogeneidade e isotropia local com recurso a correlações no espaço entre dois pontos e

auto-correlações de velocidade. So and Mellor (1973), Meroney and Bradshaw (1975), Gibson and Verriopoulos (1984) e Hoffmann et al. (1985) realizaram medições de escoamentos turbulentos com corte e curvatura sobre superfícies convexas com desenvolvimento de camada limite. Escoamentos turbulentos sobre superfícies côncavas (também com camada limite) foram estudados por Meroney and Bradshaw (1975) So and Mellor (1975) e Muck et al. (1985), sendo que estes últimos usaram curvatura acentuada e observaram vórtices longitudinais no campo médio.

Os trabalhos experimentais que acabamos de referenciar evidenciam algumas limitações que impedem o estudo de escoamentos com corte *puro*, devido à existência de camada limite nas paredes. Holloway and Tavoularis (1992) apresentam uma configuração experimental com um degrau na secção recta do canal para reduzir e porventura eliminar a presença da camada limite ao longo da secção de teste curva. A simulação do escoamento turbulento com corte e curvatura estudado por Holloway and Tavoularis (1992) é importante porque permite estudar os efeitos do corte e da curvatura de forma isolada por eliminação da camada limite nas paredes do canal curvo.

A Simulação de Escoamentos com Corte

Com o desenvolvimento dos computadores surgem nos finais da década de oitenta os primeiros estudos numéricos abordando o problema do corte, como por exemplo o trabalho de Moser and Moin (1987). Gerz et al. (1989), Kaltenbach et al. (1991) e Overholt and Pope (1996) usaram um cubo com condição de corte periódico na direcção do corte e condições periódicas nas restantes direcções para estudar o efeito do corte e do gradiente vertical do campo escalar na turbulência. Nestes estudos as equações de transporte foram discretizadas com recurso a métodos espectrais (considerados de grande precisão) e resolvidas utilizando a metodologia da simulação numérica directa (DNS).

Depois de ser conhecido o efeito do corte na turbulência, surgiu a necessidade de perceber o efeito da curvatura. Era necessário simular escoamentos de maior complexidade geométrica. Os métodos espectrais não se mostraram apropriados a este tipo de geometrias (complexas) por estarem circunscritos à utilização de condições periódicas. Também o DNS colocava dificuldades pelo facto de ser exigente do ponto de vista de recursos computacionais. Os estudos fazendo uso de modelos de turbulência baseados na metodologia das médias de Reynolds (RaNS–*Reynolds averaged Navier-Stokes*) não se revelaram adequados para o estudo do corte ou da curvatura. Estes modelos usam equações de transporte para as tensões de Reynolds, nas quais a forma matemática dos termos extra para contabilizar o efeito *estabilizador* e *desestabilizador* da mudança de curvatura se mantém em aberto. A simulação das grandes escalas de turbulência (LES–*Large Eddy Simulation*) é uma forma alternativa de resolver este problema, colocando-se em termos de exigência de recursos computacionais e complexidade matemática entre o DNS e o RaNS.

Acabámos de demonstrar a importância que a curvatura e o corte desempenham em

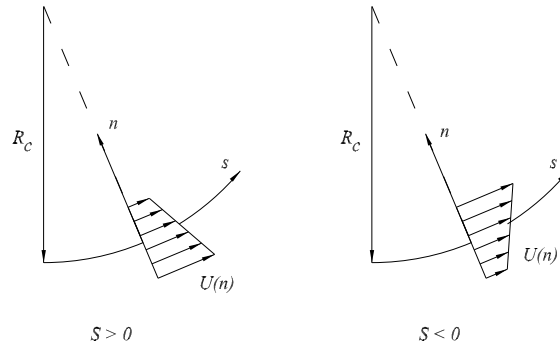


Figura 1.1: Representação esquemática do corte positivo (estável) e negativo (instável).

problemas de turbulência, dando conta do esforço que tem sido feito para melhor conhecer os efeitos que a curvatura e o corte têm na turbulência. É sabido que a curvatura pode ter efeitos *estabilizadores* ou *desestabilizadores* na turbulência, no processo de transição laminar-turbulento e na evolução enquanto escoamento turbulento, dependendo da orientação da curvatura com respeito à velocidade média e ao seu gradiente radial. A importância relativa do corte e da curvatura é contabilizada pelo parâmetro adimensional $S = (U_c/R_c)/(dU/dn)$, o qual considera a velocidade no centro do canal U_c , o seu gradiente médio dU/dn (corte) e o raio de curvatura do canal (R_c) (ver figura 1.1). Em escoamentos com S negativo, a curvatura aumenta a actividade turbulenta, desempenhando um papel *desestabilizador*, pelo contrário, quando S é positivo a curvatura tem um efeito *estabilizador* reduzindo a actividade turbulenta.

Num escoamento turbulento com curvatura, uma partícula com flutuação de velocidade superior à média ($u > 0$), e por isso com maior inércia, resiste à curvatura mais do que a média, resultando daí um movimento para fora do centro de curvatura, o que origina uma flutuação da velocidade transversal positiva ($v > 0$). Analogamente, uma partícula com flutuação de velocidade inferior à média ($u < 0$) desenvolve uma componente transversal negativa ($v < 0$). Deste modo, a curvatura provoca uma correlação uv positiva. Quando $S < 0$ a curvatura aumenta a produção das tensões de corte pelo corte médio, enquanto que quando $S > 0$ a curvatura opõe-se a essa produção. Deste modo, a curvatura pouco acentuada introduz alterações na evolução do coeficiente de fricção, enquanto que quando a curvatura é elevada a geração de vorticidade longitudinal é de maior importância.

Escalar Passivo *versus* Campo de Velocidade

Para além de estarem sujeitos a curvatura e corte, muitos escoamentos turbulentos envolvem o transporte de escalares passivos. Vários trabalhos de investigação têm revelado que as estatísticas do campo escalar em escoamentos turbulentos diferem significativamente das obtidas para o campo de velocidade. Estudos numéricos (e.g., Holzer and Siggia, 1994) e experimentais (e.g., Sreenivasan et al., 1979; Mydlarski and Warhaft, 1998) mostraram

(com recurso a funções de estrutura e às *skewness* das derivadas do campo escalar) que o campo escalar é anisotrópico nas escalas de inércia e dissipativas. Kang and Meneveau (2001) efectuaram medições de um escoamento turbulento sobre um cilindro aquecido e estudaram os efeitos da anisotropia do campo escalar passivo nas escalas de *submalha*. Verificaram que o tensor da dissipação da energia cinética tende para a isotropia nas pequenas escalas e a dissipação da variância escalar permanece anisotrópica e independente do tamanho do filtro utilizado. Do ponto de vista fundamental estas observações colocam em causa a “cascata” de Kolmogorov para a representação do transporte da variância escalar das grandes para as pequenas escalas e representam um desafio a ultrapassar pela metodologia da simulação das grandes escalas da turbulência (LES).

De acordo com a teoria clássica de Batchelor (1959), o espectro da variância escalar apresenta uma gama de escalas geralmente designada por subgama convectiva-viscosa, com declive -1 . Este regime (κ^{-1}) é limitado nas maiores escalas pela escala de comprimento de Kolmogorov ($\eta = (\nu^3/\varepsilon)^{1/4}$, ν representa a viscosidade cinemática e ε a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta) e nas menores escalas pela escala de Batchelor ($\eta_B = \eta Sc^{1/2}$, Sc representa o número de Schmidt). O regime κ^{-1} estabelece a ligação entre a subgama de inércia ($\kappa^{-5/3}$) e a subgama dissipativa. A existência do regime κ^{-1} tem sido colocada em causa (e.g., Miller and Dimotakis, 1996; Warhaft, 2000; Yeung et al., 2002), contudo, Overholt and Pope (1996) haviam já defendido a existência deste regime para números de Schmidt significativamente maiores do que 1 ($Sc \gg 1$). Um estudo mais recente, realizado por Borgas et al. (2004), no qual foram utilizados resultados de simulações DNS, evidencia a existência do regime κ^{-1} , no entanto, os coeficientes utilizados na integração espectral são cerca de 60% menores do que os considerados por Overholt and Pope (1996) ou por Yeung et al. (2002).

O comportamento do campo escalar quando transportado por um escoamento turbulento tem sido ainda estudado pela via computacional, geralmente através da simulação numérica directa (DNS) da turbulência homogénea e isotrópica, considerando o número de Prandtl (Pr), ou de forma mais geral, o número de Schmidt (Sc) aproximadamente igual a 1. Antonia and Orlandi (2003) identificaram em escoamentos com $Sc \gg 1$ a presença de “folhas” nas quais a taxa de dissipação escalar foi acentuada, sendo que a formação das referidas “folhas” foi associada à presença de taxas de deformação de natureza compressiva e de magnitude importante. Deste estudo concluíram ainda que a presença do regime κ^{-1} no espectro do campo escalar identificada em trabalhos anteriores (e.g., Tennekes and Lumley, 1999; Celani et al., 2005), não é um equívoco quando $Sc \gg 1$.

O problema da turbulência em escoamentos envolvendo o transporte de escalares passivos na presença de gradiente médio escalar tem sido também estudado com base em trabalhos de natureza teórica. O objectivo destes trabalhos foi analisar o comportamento do campo escalar nas pequenas escalas, o qual foi considerado diferenciado do já conhecido comportamento do campo de velocidade. O’Gorman and Pullin (2005) estudaram o efeito do número de Schmidt (Sc) no co-espectro da velocidade-campo escalar e mostraram que para elevados números de Schmidt, os fluxos escalares têm particular importância no

desenvolvimento das pequenas escalas. Para baixos números de Schmidt, os estudos mostraram um comportamento assintótico do co-espectro da velocidade-campo escalar e na gama inercial do campo escalar obtiveram uma lei de potência de $-11/3$ que representa um contraste relativamente aos $-5/3$ do campo de velocidade.

A Anisotropia do Campo Escalar

Com o objectivo de conhecer a estrutura das grandes e pequenas escalas do campo escalar em escoamentos turbulentos com elevado número de Péclet (Pe), Mydlarski and Warhaft (1998) fizeram medições de um escoamento em canal plano considerando uma gama de números de Reynolds ($30 < Re_\lambda < 731$) e de números de Péclet ($21 < Pe_\lambda < 512$). Chegaram a duas importantes conclusões: a natureza estatística do campo das flutuações escalares para baixos e elevados números de Reynolds é essencialmente a mesma; o campo escalar é anisotrópico nas suas grandes e pequenas escalas e independente do número de Prandtl. Estas conclusões foram confirmadas por Celani et al. (2005) quando estudaram o efeito do corte no espectro do campo escalar. Para além de terem mostrado que o corte induz anisotropia nas grandes escalas, observaram a presença de um novo regime de corte situado entre o regime de Obukhov (1949)-Corrsin (1951) ($E_\theta(\kappa) = C\epsilon^{1/3}\epsilon_\theta\kappa^{-5/3}$) e o regime de Batchelor (1959) ($E_\theta(\kappa) \propto \kappa^{-1}$). Este último, tinha aliás já sido questionado por Warhaft (2000) e por Yeung et al. (2002), entre outros.

Mydlarski (2003) estudou escoamentos com corte e gradiente escalar, recorrendo a medições em túnel de vento. O objectivo foi conhecer as variações registadas pelas estatísticas mistas da velocidade com o campo escalar passivo. Neste estudo, foram comparadas as funções densidade de probabilidade (PDF–*Probability Density Function*), espectros e funções de estrutura para uma vasta gama de números de Reynolds e Péclet, confrontando os resultados das quantidades mistas com os das quantidades individuais (velocidade e campo escalar). Os estudos revelaram que a *skewness* das derivadas do escalar era aproximadamente 1 e independente do número de Reynolds. O valor da *skewness* obtido é significativamente diferente de 0, o que significa que os escoamentos estudados por Mydlarski (2003) não apresentavam isotropia local. Esta anisotropia foi atribuída à presença da anisotropia das grandes escalas, a qual por sua vez, é provocada pela presença do gradiente de temperatura.

Os mecanismos de transferência entre as grandes e as pequenas escalas do campo escalar e do campo de velocidade foram estudados por Antonia and Orlandi (2004), utilizando a simulação numérica directa (DNS) na simulação do decaimento da turbulência isotrópica. Os espectros da velocidade e do campo escalar bem como as respectivas funções de estrutura mostraram que existe similaridade durante o decaimento da turbulência o que está de acordo com a previsão do equilíbrio de similaridade proposto por George (1992). Contudo, para grandes números de onda (pequenas escalas) verificaram que existe perda de similaridade.

Com pertinência, podemos afirmar que a noção de isotropia local que representa a base da fenomenologia moderna carece de reavaliação cuidadosa.

1.2 Objectivos e Contribuição

Pretendeu-se dispor no final deste trabalho, de um programa de computador que baseado no método das grandes escalas da turbulência (LES–*Large Eddy Simulation*) e num sistema de coordenadas genérico, fosse capaz de simular escoamentos com corte envolvendo o transporte de escalares passivos em geometrias com curvatura, dando continuidade ao trabalho de Lopes (2000). A experiência e o conhecimento adquiridos no estudo de escoamentos turbulentos com corte e curvatura, é da maior utilidade no estudo de escoamentos atmosféricos sobre terreno montanhoso, uma das áreas principais do centro de estudos de energia eólica e escoamentos atmosféricos (CeSA), no âmbito do qual este trabalho foi realizado.

A importância do estudo da turbulência é atestada pela frequência com que ocorre na maioria dos sistemas que envolvam o escoamento de fluidos. O estudo da turbulência por via computacional tem-se restringido à sua modelação por via da metodologia das médias de Reynolds (RaNS–*Reynolds averaged Navier-Stokes*). Recentemente, com o aumento das capacidades de cálculo e diminuição do custo dos computadores, tornou-se mais atractiva a simulação da totalidade das escalas do escoamento mas restringida a baixos números de Reynolds (DNS–*Direct Numerical Simulation*), ou abrangendo apenas as grandes escalas, e virtualmente sem qualquer limite no número de Reynolds simulável (LES). A simulação do efeito de curvatura das linhas de corrente no campo turbulento é, no contexto das técnicas de modelação RaNS, um problema incompletamente resolvido. A identificação do problema e das suas particularidades remonta ao estudo de Bradshaw (1973), que está na origem de muitos outros que se lhe seguiram. A modelação do efeito de curvatura, como assinalado em Bradshaw (1973), depende do ajustamento *ad-hoc* de constantes e introdução de termos extras em modelos de turbulência tipo RaNS.

A utilização de técnicas de LES em escoamentos de interesse prático exige o desenvolvimento e a validação dos modelos de tensões de *submalha* (SGS–*Sub Grid Stresses*), para além da utilização de sistemas de coordenadas que permitam a simulação de escoamentos com fronteiras geometricamente complexas. Depois de Lopes (2000) ter desenvolvido e atestado a capacidade das técnicas numéricas para lidar com geometrias complexas, o objectivo deste trabalho foi avançar no estudo da capacidade de modelação de escoamentos turbulentos com corte envolvendo o transporte de quantidades escalares passivas em situações de curvatura das linhas de corrente para estudar os efeitos da curvatura, do corte e do gradiente vertical do campo escalar na turbulência. Para isso recorreremos à simulação de uma série de escoamentos fundamentais em circunstâncias de turbulência homogénea em decaimento e estacionária (por efeito de re-injecção de energia) e na presença de corte uniforme. Estudámos também o efeito do corte, da curvatura e contra-curvatura das lin-

has de corrente, primeiro isoladamente e depois em conjunto com o transporte de escalares passivos.

Os primeiros estudos envolvendo problemas com corte foram realizados em canal plano com desenvolvimento de camada limite (e.g., Champagne et al., 1970). Durante cerca de 20 anos foram estudados escoamentos com corte até surgir o primeiro trabalho em que Holloway and Tavoularis (1992) analisaram o efeito da curvatura na turbulência. Chebbi et al. (1998) estudaram o efeito da curvatura e contra-curvatura na turbulência perante condições de corte semelhantes. Contudo, como os próprios autores destes dois últimos trabalhos referem e apesar da solução hábil que apresentam na tentativa de eliminar o desenvolvimento da camada limite, não foi possível converter os escoamentos em escoamentos de corte *puro*, o que significa que os efeitos observados não se devem apenas ao corte e curvatura mas também à presença da camada limite.

Pretendemos simular os escoamentos com curvatura medidos por Holloway and Tavoularis (1992) e os escoamentos com curvatura e contra-curvatura medidos por Chebbi et al. (1998) na ausência de camada limite para estudar os efeitos do corte e da sua intensidade, da curvatura e contra-curvatura e respectiva amplitude do raio de curvatura, bem como do gradiente vertical do campo escalar na turbulência.

1.3 Conteúdo da Tese

A presente tese divide-se em seis capítulos, incluindo este (capítulo 1), de introdução e dois apêndices (A e B).

Os capítulos 3 a 5 têm uma estrutura semelhante. Começam com um resumo do trabalho realizado, onde indicamos os métodos principais utilizados e as conclusões retiradas dos resultados. A título introdutório, na primeira secção de cada um dos capítulos 3 a 5, enunciamos o nosso contributo dando conta da utilidade do estudo. Na secção seguinte, identificamos o modelo matemático e os métodos numéricos necessários à resolução de cada problema. Na terceira secção de cada capítulo fazemos a apresentação e análise dos resultados obtidos, confrontando sempre que possível os nossos resultados com os resultados obtidos em outros trabalhos, e na quarta e última secção são apresentadas as conclusões.

No capítulo 2 descrevemos as equações fundamentais, considerando a simulação numérica directa e a simulação das grandes escalas da turbulência e identificamos as técnicas numéricas utilizadas na discretização da equação de transporte escalar e dos termos de força e de corte.

No capítulo 3 do presente trabalho foram introduzidas duas alterações na física do problema abordado no capítulo 5 da tese de Doutoramento de Lopes (2000): a turbulência foi forçada e envolveu o transporte de escalares passivos com corte e gradiente vertical do campo escalar. Para avaliar a capacidade dos métodos numéricos utilizados na resolução destes escoamentos sobre geometrias complexas, procedeu-se a uma distorção do

domínio de cálculo considerando graus de distorção diversos. Os resultados mostraram que as distribuições estatísticas do campo escalar, derivadas da velocidade, correlações entre vorticidade e gradiente escalar e correlações entre taxas de deformação e gradiente escalar são invariáveis face à distorção do domínio de cálculo. Concluimos que as aproximações de volumes finitos em malhas não-ortogonais podem ser usadas na simulação numérica directa de escoamentos em turbulência forçada e com decaimento de escalares passivos com corte e gradiente vertical do campo escalar.

No capítulo 4 descrevemos a simulação do escoamento turbulento com corte num canal com curvatura, usando a simulação das grandes escalas da turbulência (LES). Trata-se de um escoamento com corte e sem camada limite do qual dispomos de resultados experimentais, para a validação do modelo matemático e das técnicas numéricas. Este capítulo teve como objectivo estudar a influência do tempo de integração, da malha e da condição de entrada na solução do problema e estudar o efeito do corte e o efeito combinado da curvatura e do corte na turbulência. De entre as três condições de entrada utilizadas a mais adequada foi a que usou um campo obtido na simulação prévia de um escoamento com corte num cubo com 64^3 nós. Os resultados numéricos e experimentais apresentaram boa concordância e mostraram que: na zona recta, as tensões de Reynolds crescem fruto de uma transferência de energia do campo médio para o campo turbulento por acção do corte; na zona curva o crescimento das tensões de Reynolds é mais acentuado e é provocado pela curvatura nas linhas de corrente.

No capítulo 5 abordamos a simulação das grandes escalas da turbulência (LES) de um escoamento com corte e gradiente escalar na direcção vertical, do qual são conhecidos resultados experimentais. A geometria considerada foi um canal com dupla curvatura e o objectivo foi estudar os efeitos da mudança de curvatura e da intensidade do corte e da curvatura na turbulência e no transporte de escalares passivos. Considerámos diferentes intensidades de corte e do gradiente escalar e vários raios de curvatura. Recorrendo à evolução ao longo da linha de eixo do canal das tensões de Reynolds e da sua anisotropia, ao andamento da anisotropia das tensões principais e da sua orientação relativamente à direcção s do escoamento e à evolução dos fluxos e da variância escalares, foi possível concluir que: a curvatura e contra-curvatura e a sua intensidade, bem como a intensidade do corte e do gradiente vertical do campo escalar, desempenham um papel *estabilizador*, diminuindo o crescimento da turbulência quando o corte é positivo e desempenham um papel *desestabilizador*, promovendo o crescimento da turbulência quando o corte é negativo.

No capítulo 6 e último, apresentamos as conclusões principais do trabalho efectuado e indicamos algumas propostas de trabalho futuro.

No apêndice A mostramos a fragilidade da condição de Orlanski (1976) na simulação do escoamento de elevado número de Reynolds com gradiente vertical de velocidade ao longo de um canal curvo. A designada condição de Orlanski, aplicada na simulação de um escoamento turbulento no interior de um canal plano ou de um canal com dupla curvatura não revelou qualquer instabilidade. O estudo mostrou que podemos melhorar o desempenho

da condição de Orlanski: (i) recorrendo a uma determinação local da velocidade convectiva; (ii) ou usando malhas que expandem na direcção da saída. Esquemas de discretização mais simples, como por exemplo, Euler explícito (2^a ordem), revelaram ser mais estáveis do que esquemas de ordem superior do tipo Runge-Kutta (4,3). A condição de saída de gradiente nulo, do ponto de vista numérico, revelou ser tão estável como a condição de saída resolvida usando discretização por Euler explícito.

No apêndice B apresentamos a derivação e a adimensionalização dos termos de corte usados nas equações (3.2) e (3.3), as quais fazem parte do modelo matemático usado nas simulações do capítulo 3.

Capítulo 2

Modelos Matemáticos e Técnicas Numéricas

Resumo do Capítulo

Neste capítulo descrevemos o modelo matemático utilizado ao longo desta tese. Este modelo tem a capacidade de simular o transporte de escalares passivos em regime forçado, com corte e gradiente vertical do campo escalar, admitindo que os escoamentos são incompressíveis e o fluido Newtoniano. São consideradas as duas abordagens usadas nas simulações apresentadas nos capítulos 3 a 5: a simulação numérica directa (DNS–*Direct Numerical Simulation*) e a simulação das grandes escalas da turbulência (LES–*Large Eddy Simulation*). Descrevemos também as técnicas numéricas utilizadas na discretização da equação de transporte escalar e nas equações de Navier-Stokes, tendo por base o método dos volumes finitos em coordenadas não-ortogonais e discretização por diferenças finitas centrais de segunda ordem de precisão. Por último, apresentamos a discretização dos termos de corte na equação de transporte do campo escalar, e dos termos de corte e de força nas equações de Navier-Stokes.

2.1 Introdução

As equações fundamentais da mecânica de fluidos (continuidade e Navier-Stokes) resultam da aplicação de princípios físicos de conservação (princípio de conservação de massa e princípio de conservação de quantidade de movimento, ou segunda lei de Newton) a uma porção de fluido contida numa determinada região do espaço geralmente designada por volume de controlo. Estas são equações diferenciais às derivadas parciais, não-lineares, de segunda ordem, para as quais não é conhecida solução analítica no seu caso mais ge-

ral (Pope, 2000).

Para resolver estas equações numericamente (actualmente a única forma possível de resolução), é necessária uma técnica de discretização que aproxime a solução das equações diferenciais através de um sistema de equações algébricas cujas incógnitas (campos de velocidade, pressão e escalar) são definidas num conjunto discreto e finito de pontos no espaço e no tempo. Existem várias técnicas para a discretização das equações (e.g., diferenças finitas, elementos finitos) sendo os métodos espectrais os mais comuns em estudos fundamentais de turbulência em escoamentos geometricamente simples. Em aplicações no âmbito da engenharia, o método dos volumes finitos tem sido preferido por se mostrar mais adequado em geometrias complexas (Ferziger and Perić, 2002).

É possível resolver as equações do movimento sem recurso a qualquer aproximação para modelação dos fenómenos físicos, usando a simulação numérica directa (DNS). No entanto, grande parte dos escoamentos de interesse prático são turbulentos e possuem uma gama larga de escalas características que têm de ser resolvidas, o que impossibilita o uso de DNS, devido aos recursos computacionais exigidos. Isto justifica o desenvolvimento de metodologias alternativas, como por exemplo, a simulação das grandes escalas da turbulência (LES) segundo a qual apenas uma parte das escalas presentes no escoamento são resolvidas e o efeito que as não resolvidas têm naquelas é modelado.

O presente capítulo foi organizado em 3 secções, onde apresentamos os modelos matemáticos e técnicas numéricas utilizadas. Após uma breve introdução, apresentamos na secção 2.2 as equações fundamentais que regem o transporte de escalares passivos em escoamentos turbulentos incompressíveis, considerando as duas abordagens utilizadas nas simulações descritas nos capítulos 3 a 5: a simulação numérica directa (DNS) na subsecção 2.2.1, e a simulação das grandes escalas da turbulência (LES) na subsecção 2.2.2. Na secção 2.3 descrevemos as técnicas numéricas utilizadas na discretização: da equação de transporte escalar (subsecção 2.3.1); das equações de Navier-Stokes (subsecção 2.3.2); dos termos de corte (subsecção 2.3.3) e do termo de força (subsecção 2.3.4).

2.2 Equações Fundamentais

As equações que regem o transporte de escalares passivos em escoamentos turbulentos incompressíveis são a equação da continuidade,

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.1)$$

as equações de Navier-Stokes,

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + f_k, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.2)$$

e a equação de transporte escalar,

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_j \phi)}{\partial x_j} = \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_j}, \quad (2.3)$$

onde ρ representa a massa volúmica, u_i e x_i as componentes Cartesianas do vector velocidade e do vector posição, t é o tempo, τ_{ij} é o tensor das tensões, p a pressão, ϕ o escalar passivo e $\Gamma = 1/(Pr \cdot Re)$ a difusividade turbulenta.

2.2.1 Simulação Numérica Directa (DNS)

A simulação numérica directa (DNS) consiste na resolução das equações do escoamento, equações (2.1) a (2.3), sem recurso a qualquer equação adicional para modelação dos fenómenos turbulentos. As únicas aproximações existentes são associadas às aproximações numéricas. O custo computacional da simulação é determinado pela resolução espacial e temporal. O tamanho do domínio L deve ser suficientemente grande para representar a energia contida no movimento; o espaçamento da malha Δx e o passo no tempo Δt usado no avanço da solução têm de ser suficientemente pequenos para captar o processo de dissipação até às pequenas escalas.

2.2.1.1 Exigências de Resolução Espacial e Temporal da Simulação

A resolução das escalas dissipativas η (escalas de Kolmogorov) requer um espaçamento da malha $\Delta x/\eta$ a que corresponde um número de onda $k_{max}\eta$. Yeung and Pope (1989) sugerem que $\Delta x/\eta \approx 2.1$ e $k_{max}\eta \geq 1.5$ são bons critérios para a resolução das pequenas escalas. De acordo com Pope (2000), o número total de modos de Fourier aumenta de acordo com a equação,

$$N^3 \sim 0.06 Re_\lambda^{9/2}. \quad (2.4)$$

Reynolds (1990) propôs uma estimativa idêntica, $N^3 \sim 0.1 R_\lambda^{9/2}$, onde Re_λ representa o número de Reynolds baseado na microescala de Taylor.

A duração da simulação é tipicamente 4 vezes a escala temporal $\tau = k/\varepsilon$ (k representa a energia cinética da turbulência e ε a sua taxa de dissipação) e número de passos de tempo requerido é

$$M \sim 9.2 R_\lambda^{3/2}. \quad (2.5)$$

Para que o avanço da solução no tempo seja preciso, é necessário que o movimento das partículas de fluido seja função do espaçamento da malha Δx e do passo de tempo Δt . Na prática, é necessário garantir que os seguintes critérios (para a convecção e para a difusão) sejam satisfeitos:

$$C_j = \left| \sum (u_i B_{ij}) \right| \frac{\Delta t}{J}, \quad C_j \leq 0,1 \quad (2.6)$$

$$S_j = \mu \frac{\Delta t}{(\Delta x_j^2 + \Delta y_j^2 + \Delta z_j^2)}, \quad \sum S_j \leq 0,1 \quad (2.7)$$

onde, $i = 1, 2, 3$ e $j = \xi, \eta, \zeta$ (j representa a direcção computacional), u_i são as componentes da velocidade, B_{ij} e J os co-factores e determinante da matriz de transformação de coordenadas, respectivamente.

Numa aproximação, o número de operações em vírgula flutuante requerido para efectuar a simulação é proporcional ao produto do número de modos pelo número de passos,

$$N^3 M \sim 0.55 R_\lambda^6, \quad (2.8)$$

o qual mostra forte variação com o número de Reynolds. A simulação de escoamentos com número de Reynolds elevado (os mais comuns em aplicações de engenharia, Kim et al. (1987)) justifica o desenvolvimento de alternativas menos exigentes em termos computacionais do que o DNS, como seja o método da simulação das grandes escalas da turbulência (LES) descrito na secção seguinte.

2.2.2 Simulação das Grandes Escalas da Turbulência (LES)

A primeira aplicação da simulação das grandes escalas da turbulência (LES) é atribuída a Deardorff (1970). Segundo Ferziger (1997), a utilização do método das grandes escalas da turbulência tem substituído a do método das médias de Reynolds (RaNS–*Reynolds averaged Navier-Stokes*) em escoamentos com libertação de calor ou estratificação, rotação ou curvatura, os quais afectam a produção e a dissipação da turbulência. Contudo, ainda segundo Ferziger (1997), em escoamentos cujas tensões normais à direcção principal são predominantes, os métodos das médias de Reynolds produzem resultados satisfatórios. Em termos de escalas resolvidas e custo computacional, o método das grandes escalas da turbulência é considerado intermédio entre o método das médias de Reynolds e a simulação numérica directa.

Segundo a metodologia LES qualquer campo pode ser decomposto em duas contribuições: o campo das grandes escalas também designado por *campo resolvido*, e o campo das pequenas escalas, designado *campo residual* ou de *submalha* (*subgrid*). A separação entre o campo resolvido e o campo residual é conseguida por meio de uma operação de filtragem espacial (Leonard, 1974)

$$\bar{u}_i(\mathbf{x}, t) = \int u_i(\mathbf{x}', t) G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}',$$

em que \bar{u}_i é o campo resolvido e G , uma função filtro.

Para que as equações para o campo filtrado sejam equivalentes às equações de Navier-Stokes, é necessário que a função G seja tal que a filtragem possa permutar com a derivação ($\partial \bar{u}_i / \partial x_i = \partial \bar{u}_i / \partial x_i$). Isto acontece apenas no caso de a malha ser uniforme. Contudo,

Ghosal and Moin (1995) mostraram que, quando se usam as equações derivadas admitindo possível a comutação, o erro introduzido é da mesma ordem de grandeza do provocado pela discretização por um esquema de diferenças finitas centrais de segunda ordem de precisão.

Filtrando as equações (2.1) a (2.3) e procedendo à sua adimensionalização, usando a semialtura do canal h_{in} para escala de comprimento e a velocidade na linha de eixo do canal U_c como escala da velocidade, obtemos as equações para o campo resolvido:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{u}_i}{\partial x_j} = \frac{2}{Re_b} \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{\phi}}{\partial x_j} = \frac{2}{Pr \cdot Re_b} \frac{\partial^2 \bar{\phi}}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (2.11)$$

onde $Re_b = 2U_c h_{in} / \nu$ é o número de Reynolds (baseado na semialtura do canal) e Pr o número de Prandtl.

O efeito que o campo residual tem no campo resolvido necessita ser modelado e é contabilizado pelas tensões e pelos fluxos escalares residuais ou de *submalha* (SGS–*Sub Grid Stresses*) τ_{ij} e q_j .

2.2.2.1 Modelos de *Submalha*

Existem vários modelos de tensões residuais, os quais se podem agrupar em quatro categorias: de viscosidade/difusividade turbilhonar, de similaridade, mistos (combinam expressões dos dois tipos anteriores) e dinâmicos. Uma descrição pormenorizada destes modelos pode ser encontrada, por exemplo, em Lesieur and Métais (1996) e Orlandi (2000), ou mais recentemente em Sagaut (2005).

Os modelos de viscosidade turbilhonar mais divulgados são o de Smagorinsky (1963) e os propostos por Kraichnan (1976) e Chollet and Lesieur (1981) para turbulência homogénea. Uma das limitações do modelo de Smagorinsky (o mais utilizado em aplicações de engenharia) é não prever a redução da viscosidade residual que deve ocorrer junto a uma parede sólida. Outra limitação é assumir que o campo residual e o campo resolvido estão sempre em equilíbrio. Segundo Reynolds (1990), tal não se verifica em escoamentos em transição para turbulência, relaminarização ou troca rápida de um estado para o outro. As suas vantagens são o facto de proporcionar boas previsões de quantidades importantes como a velocidade média e as flutuações r.m.s. (*root mean square*), bem como a previsão correcta da dissipação nas escalas residuais, o que justifica ser o de utilização mais frequente.

Os modelos de similaridade mais divulgados são de Bardina et al. (1983) e os propostos por Goutorbe et al. (1994) e Liu et al. (1994). Estes modelos consideram que as interações

mais importantes entre os campos resolvido e residual envolvem as escalas resolvidas menores e as escalas residuais maiores. Uma análise *à priori* mostra uma boa correlação entre as tensões calculadas usando estes modelos e as tensões reais. No entanto, segundo Liu et al. (1994), por causa da filtragem adicional, o tensor das tensões residuais modelado influencia escalas maiores do que as afectadas pela interacção exacta entre o campo resolvido e o residual. De acordo com Domaradzki and Saiki (1997), o modelo de Bardina et al. (1983) subestima a dissipação nas escalas residuais; consequentemente as previsões das quantidades médias e r.m.s. são menos satisfatórias que as dos modelos de viscosidade turbilhonar.

Os modelos mistos mais conhecidos são o de Bardina et al. (1983) e o de Zhang et al. (1993) e são obtidos adicionando uma expressão de viscosidade turbilhonar aos modelos de similaridade. Estes modelos tinham como objectivo principal combinar as capacidades de previsão dos modelos de similaridade (melhores correlações entre as quantidades reais e as modeladas) com as características de dissipação dos modelos de viscosidade turbilhonar. Segundo Domaradzki and Saiki (1997), os modelos mistos fazem boa previsão da transferência de energia do campo residual para o resolvido e proporcionam resultados idênticos aos obtidos utilizando o modelo de Smagorinsky. No entanto, não são de utilização muito frequente, por dependerem do filtro utilizado e os resultados que proporcionam não serem muito melhores.

Usamos o modelo dinâmico Lagrangeano pelo facto de ser o que melhor reproduz a cascata de energia e a transferência de energia das grandes para as pequenas escalas. De acordo com Piomelli et al. (1991) e Kerr et al. (1996), a transferência de energia das escalas residuais para as resolvidas (*backscatter*), embora seja de menor intensidade, também pode ser significativa e não é prevista pelos modelos citados anteriormente. Este modelo dinâmico foi proposto por Meneveau et al. (1996) e aplicado a geometrias discretizadas em sistemas de coordenadas não-ortogonais por Jordan (1999), Armenio and Piomelli (2000) e Lopes et al. (2003). As tensões e os fluxos escalares de *submalha* (τ_{ij} e q_j) são definidas por:

$$\tau_{ij} - \delta_{ij}\tau_{kk}/3 = -2\nu_T\bar{S}_{ij} = -2C_s\bar{\Delta}^2|\bar{S}|\bar{S}_{ij}; \quad q_j = -C_\phi\bar{\Delta}^2|\bar{S}|\frac{\partial\bar{\phi}}{\partial x_j}, \quad (2.12)$$

onde, $\bar{\Delta} = 2(\bar{\Delta x} \bar{\Delta y} \bar{\Delta z})^{1/3}$ é a largura do filtro, $\bar{S}_{ij} = (\partial\bar{u}_i/\partial\bar{x}_j + \partial\bar{u}_j/\partial\bar{x}_i)/2$ o tensor resolvido das taxas de deformação e $|\bar{S}| = (2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij})^{1/2}$ a sua amplitude. As constantes C_s e C_ϕ foram calculadas usando o modelo dinâmico de Germano et al. (1991) e calculando médias Lagrangeanas (na direcção das linhas de corrente), utilizando as técnicas propostas por Meneveau et al. (1996).

A primeira utilização de um modelo dinâmico deve-se a Germano et al. (1991), tendo como base o modelo de Smagorinsky (1963), também conhecido por modelo de Smagorinsky-Lilly, sendo que o último utiliza um coeficiente de Smagorinsky constante ($C_s \in [0.1; 0.2]$) e o modelo dinâmico usa um C_s local. O modelo dinâmico necessita de uma segunda operação de filtragem, com um filtro de comprimento característico maior, para

obter novos campos e as respectivas tensões e fluxos escalares residuais (que é possível calcular explicitamente). Posteriormente, obtém uma aproximação para essas tensões utilizando o modelo de Smagorinsky; comparando as tensões exactas com a aproximação, é possível ajustar a constante C_s , que vai depois ser usada na modelação das tensões residuais dos campos de velocidade originais.

Filtrando as equações (2.9) a (2.10) com o filtro de malha (*grid filter*) obtemos as tensões de *submalha*:

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{u_i} \overline{u_j} . \quad (2.13)$$

Filtrando novamente as equações (2.9) a (2.10) com o filtro temporal (*test filter*) resultam equações semelhantes mas com tensões de *submalha* diferentes:

$$T_{ij} = \widehat{\overline{u_i u_j}} - \widehat{\overline{u_i}} \widehat{\overline{u_j}} , \quad (2.14)$$

onde os operadores $\overline{(\dots)}$ e $\widehat{(\dots)}$ representam as operações de filtragem na malha, seguida de filtragem temporal. Os dois termos das tensões de *submalha* são representados pela identidade de Germano:

$$\mathcal{L}_{ij} = T_{ij} - \widehat{\tau_{ij}} , \quad (2.15)$$

onde

$$\mathcal{L}_{ij} = \widehat{\overline{u_i} \overline{u_j}} - \widehat{\overline{u_i}} \widehat{\overline{u_j}} , \quad (2.16)$$

são as tensões turbulentas resolvidas. A identidade de Germano é usada para calcular o valor dinâmico local do C_s aplicando o modelo de Smagorinsky a T_{ij} e τ_{ij} . A parte anisotrópica de \mathcal{L}_{ij} é representada por:

$$\mathcal{L}_{ij} - \delta_{ij} \mathcal{L}_{kk} / 3 = -2C_s M_{ij} , \quad (2.17)$$

onde

$$M_{ij} = (\Delta^t)^2 \widehat{|\overline{S}| \overline{S}_{ij}} - (\Delta^r)^2 (\widehat{|\overline{S}| \overline{S}_{ij}}) . \quad (2.18)$$

C_s foi calculado usando a alternativa de Lilly (1992),

$$C_s^2 = -\frac{1}{2} \frac{\mathcal{L}_{kl} M_{kl}}{M_{mn} M_{mn}} . \quad (2.19)$$

A viscosidade turbulenta de *submalha* (μ_{sgs}) foi modelada por:

$$\mu_{sgs} = \rho (C_s \overline{\Delta})^2 |\overline{S}| , \quad (2.20)$$

e a viscosidade efectiva (μ_{eff}) foi calculada em função da viscosidade molecular (μ_{mol}) e da viscosidade de *submalha*,

$$\mu_{eff} = \mu_{mol} + \mu_{sgs} , \quad (2.21)$$

A difusividade do campo escalar ($\Gamma = 2/(Pr \cdot Re_b)$) foi calculada à custa da viscosidade efectiva e do número de Prandtl,

$$\Gamma = \mu_{eff} / Pr . \quad (2.22)$$

2.3 Técnicas Numéricas

As equações diferenciais (2.1) a (2.3) foram discretizadas para malhas estruturadas usando a técnica de volumes finitos, em coordenadas não-ortogonais. Os fluxos convectivos e difusivos foram aproximados por diferenças finitas centrais de segunda ordem e o avanço temporal foi feito com recurso ao esquema Runge-Kutta (4,3) de quatro sub-passos e terceira ordem de precisão (Carpenter and Kennedy, 1994) e o termo de pressão utilizando o procedimento de passo-fraccionado (Kim and Moin, 1985). Mais detalhes acerca da discretização das equações de transporte podem ser encontrados em Ferziger and Perić (2002) e Toro (1999), entre outros.

Ao tratar o decaimento da turbulência isotrópica, Lopes (2000) concluiu que as diferenças finitas centrais de segunda ordem de precisão para a discretização espacial e o método de Runge-Kutta (4,3) para a discretização temporal, são um bom compromisso entre esforço computacional e precisão. Deste modo, optámos por utilizar as mesmas técnicas para a discretização dos termos de força, corte e equação de transporte escalar.

Para discretização espacial das equações de transporte, o domínio de cálculo foi dividido num conjunto finito de volumes de controlo contíguos, (volumes finitos) como apresentamos na figura 2.1, aos quais aplicamos a formulação integral das equações. Começamos por

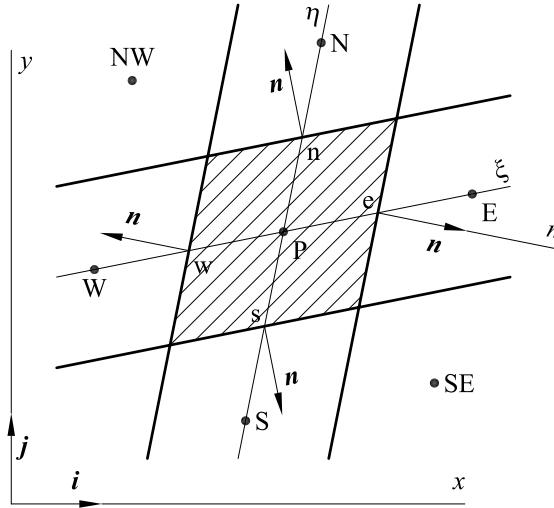


Figura 2.1: Volume de controlo bidimensional e notação usada para designar as suas faces e os volumes de controlo vizinhos.

descrever a discretização da equação de transporte escalar, mais simples e com menos termos do que a as equações de Navies-Stokes.

2.3.1 Discretização da Equação de Transporte Escalar

A discretização do termo convectivo na equação (2.3) é dada por:

$$\int_S \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l \int_{Sl} \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l F_l^c, \quad l = e, w, n, s, \dots \quad (2.23)$$

onde F_l^c é o fluxo convectivo de ϕ em cada face do volume de controlo e o sub-índice l representa cada uma das seis faces do volume de controlo. Por exemplo, para o caso do fluxo na face “e”, fica:

$$F_e^c = \int_{Sl} \rho \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS \approx \dot{m}_e \phi_e, \quad (2.24)$$

onde,

$$\dot{m}_e = \int_{Sl} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (2.25)$$

é o fluxo mássico na face “e”. O escalar na face do volume de controlo é obtido por interpolação linear a partir dos volumes de controlo adjacentes. A discretização do termo difusivo é:

$$\int_S \Gamma_{\phi} b_s \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l \int_{Sl} \Gamma_{\phi} b_s \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS = \sum_l F_l^d, \quad l = e, w, n, s, \dots \quad (2.26)$$

onde F_l^d representa o fluxo difusivo de ϕ na face l do volume de controlo. Para o caso da face “e” resulta:

$$F_e^d = \int_S \Gamma_{\phi} b_s \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS \approx (\Gamma_{\phi} b_s \nabla \phi \cdot \mathbf{n})_e S_e. \quad (2.27)$$

2.3.1.1 Aproximações Usadas em Malhas Cartesianas

A utilização do método dos volumes finitos conduz a um balanço entre os fluxos convectivos e difusivos através das faces do volume de controlo e a produção/destruição no seu interior. Aqui introduziremos as aproximações usadas para obter os valores de ϕ e das suas derivadas nas faces do volume de controlo. Consideremos, primeiro, o fluxo convectivo,

$$F_e^c \approx \dot{m}_e \phi_e,$$

que requer o conhecimento de ϕ na face *Este* do volume de controlo. Utilizámos diferenças finitas centrais (*CDS—Central Differencing Scheme*) para efectuar a interpolação linear entre os nós mais próximos. Considerando um coeficiente de interpolação linear,

$$\lambda_e = \frac{x_E - x_e}{x_E - x_P}, \quad (2.28)$$

a aproximação para ϕ_e é

$$\phi_e = \lambda_e \phi_P + (1 - \lambda_e) \phi_E . \quad (2.29)$$

Consideremos, agora, o fluxo difusivo

$$F_e^d \approx (\Gamma_\phi b s \nabla \phi \cdot \mathbf{n})_e S_e = \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \Delta y \Delta z ,$$

o qual exige o conhecimento do coeficiente de difusão Γ_ϕ e da derivada $\partial \phi / \partial x$ na face *Este* do volume de controlo. Para o coeficiente de difusão, usámos a aproximação linear definida em (2.29); para a derivada $\partial \phi / \partial x$, recorreremos de novo às diferenças finitas centrais:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} .$$

2.3.1.2 Aproximações Usadas em Malhas Não-Ortogonais

A aproximação do fluxo convectivo numa malha não-ortogonal é idêntica à de uma malha Cartesiana, por isso usamos a equação (2.29). É apenas necessária uma nova definição do coeficiente de interpolação linear (2.28), para se considerar o facto de a malha ser curvilínea:

$$\lambda_e = \frac{\| \mathbf{x}_E - \mathbf{x}_e \|}{\| \mathbf{x}_E - \mathbf{x}_e \| + \| \mathbf{x}_e - \mathbf{x}_P \|} . \quad (2.30)$$

A aproximação do fluxo difusivo faz intervir termos adicionais, dado que o vector normal à superfície de controlo pode ter componentes segundo várias direcções Cartesianas:

$$F_e^d \approx (\Gamma_\phi b s \nabla \phi \cdot \mathbf{n})_e S_e = \Gamma_{\phi,e} \sum_i \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)_e S_e^i . \quad (2.31)$$

S_e^i são as componentes do vector superfície da face,

$$\mathbf{S}_e = S_e \mathbf{n} = S_e^x \mathbf{i} + S_e^y \mathbf{j} + S_e^z \mathbf{k} .$$

Para o cálculo das derivadas $\partial \phi / \partial x_i$, é necessário usar uma transformação de coordenadas, definida por $x_i = x_i(\xi_j)$, $j = 1, 2, 3$ e caracterizada pelo Jacobiano J :

$$J = \det \left(\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} \right) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{vmatrix} . \quad (2.32)$$

Usando esta transformação, as derivadas com respeito às coordenadas Cartesianas calculam-se por:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} \frac{\beta^{ij}}{J}, \quad (2.33)$$

em que β^{ij} representa o cofactor de $\partial x_i / \partial \xi_j$ no Jacobiano J . As componentes do vector superfície das faces podem também ser definidas em função dos cofactores β^{ij} por

$$S_e^i = \beta_e^{i1} \Delta \eta \Delta \zeta, \quad S_n^i = \beta_n^{i2} \Delta \xi \Delta \zeta, \quad S_t^i = \beta_t^{i3} \Delta \xi \Delta \eta.$$

Definindo os coeficientes B^{ij} como

$$B^{ij} = \beta^{lj} \beta^{li} = \beta^{1j} \beta^{1i} + \beta^{2j} \beta^{2i} + \beta^{3j} \beta^{3i}, \quad (2.34)$$

obtemos a aproximação para o fluxo difusivo na face *Este* do volume de controlo por

$$F_e^d \approx \left(\frac{\Gamma \phi}{J} \right)_e \sum_j \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi_j} B^{1j} \right)_e \Delta \eta \Delta \zeta. \quad (2.35)$$

A diferença entre esta expressão e a do fluxo difusivo em coordenadas Cartesianas é que, enquanto nela é necessário aproximar as derivadas na face em todas as direcções e escolher aproximações adequadas para todas elas, na do fluxo difusivo em coordenadas Cartesianas tal apenas é necessário na direcção normal à face. A derivada na direcção ξ pode ser aproximada por diferenças finitas centrais entre os nós P e E, tal como no caso das malhas Cartesianas:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta \xi}.$$

Para as derivadas nas direcções η e ζ , uma das hipóteses possíveis é calcular os seus valores nos nós P e E e usar depois o coeficiente de interpolação (2.30), para obter um valor na face, supondo uma variação linear das derivadas entre os nós P e E:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_e &\approx \lambda_e \left(\frac{\delta \phi}{\delta \eta} \right)_P + (1 - \lambda_e) \left(\frac{\delta \phi}{\delta \eta} \right)_E, \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial \zeta} \right)_e &\approx \lambda_e \left(\frac{\delta \phi}{\delta \zeta} \right)_P + (1 - \lambda_e) \left(\frac{\delta \phi}{\delta \zeta} \right)_E. \end{aligned}$$

A aproximação das derivadas nos nós em relação às direcções da malha não-ortogonal não apresenta dificuldades de maior e pode ser usada novamente a fórmula das diferenças finitas centrais. A título de exemplo, apresentamos a aproximação da derivada $\partial \phi / \partial \eta$:

$$\frac{\delta \phi}{\delta \eta} = \frac{\phi_n - \phi_s}{\Delta \eta},$$

em que ϕ_n é obtido supondo uma variação linear de ϕ entre os nós P e N e ϕ_s , uma variação linear de ϕ entre os nós S e P.

2.3.2 Discretização das Equações de Continuidade e de Navier-Stokes

A velocidade é uma grandeza vectorial, por via do que as suas equações de transporte apresentam algumas diferenças em relação à equação de transporte genérica. Começemos por considerar a formulação integral da equação da continuidade (2.1):

$$\int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0 . \quad (2.36)$$

A sua discretização traduz-se num balanço dos fluxos mássicos que entram e saem do volume de controlo:

$$\int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = \sum_l \int_{S_l} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = \sum_l \dot{m}_l , \quad l = e, w, n, s, \dots$$

Consideremos agora a formulação integral da equação (2.2):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho u_i \, dV + \int_S \rho u_i \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_S \tau_{ij} \mathbf{i}_j \cdot \mathbf{n} \, dS - \int_S p \mathbf{i}_i \cdot \mathbf{n} \, dS + \int_V f_k \, dV . \quad (2.37)$$

O termo que representa o transporte convectivo é,

$$F_{i,e}^c = \int_{S_e} \rho u_i \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx \dot{m}_e u_{i,e} .$$

Para obter uma aproximação para $u_{i,e}$, utilizámos as aproximações já descritas para a equação de transporte escalar, quer em coordenadas Cartesianas, quer em coordenadas não-ortogonais.

O tratamento dos termos que representam o transporte difusivo,

$$F_{i,e}^d = \int_{S_e} \tau_{ij} \mathbf{i}_j \cdot \mathbf{n} \, dS ,$$

e o gradiente de pressão,

$$Q_i^p = - \int_S p \mathbf{i}_i \cdot \mathbf{n} \, dS ,$$

é diferente consoante a malha seja Cartesiana ou não-ortogonal; apresentamo-lo a seguir.

2.3.2.1 Aproximações Usadas em Malhas Cartesianas

Numa malha Cartesiana, a direcção normal à face do volume de controlo coincide com uma das direcções Cartesianas, o que simplifica o termo difusivo e o termo do gradiente de pressão. Assim, o termo difusivo na face *Este* do volume de controlo é

$$F_{i,e}^d = \int_{S_e} \tau_{ix} dS \approx (\tau_{ix})_e S_e . \quad (2.38)$$

As tensões nas faces do volume de controlo são obtidas, usando diferenças finitas centrais, por

$$\begin{aligned} (\tau_{xx})_e &= 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_e \approx 2\mu \frac{u_E - u_P}{x_E - x_P} , \\ (\tau_{yx})_e &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)_e \approx \mu \frac{v_E - v_P}{x_E - x_P} + \mu \left(\frac{\delta u}{\delta y} \right)_e , \\ (\tau_{zx})_e &= \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right)_e \approx \mu \frac{w_E - w_P}{x_E - x_P} + \mu \left(\frac{\delta u}{\delta z} \right)_e . \end{aligned}$$

As derivadas na face do volume de controlo em ordem a direcções tangentes à face são obtidas interpolando-as a partir dos valores nodais. A título de exemplo:

$$\left(\frac{\delta u}{\delta y} \right)_e = \lambda_e \left(\frac{\delta u}{\delta y} \right)_P + (1 - \lambda_e) \left(\frac{\delta u}{\delta y} \right)_E .$$

Os termos que representam a contribuição do gradiente de pressão são discretizados por

$$Q_u^p = - \int_S p \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} dS \approx -(p_e - p_w) \Delta y \Delta z , \quad (2.39)$$

$$Q_v^p = - \int_S p \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} dS \approx -(p_n - p_s) \Delta x \Delta z , \quad (2.40)$$

$$Q_w^p = - \int_S p \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} dS \approx -(p_t - p_b) \Delta x \Delta y , \quad (2.41)$$

obtendo-se a pressão nas faces dos volumes de controlo por meio da interpolação linear definida em (2.28).

2.3.2.2 Aproximações Usadas em Malhas Não-Ortogonais

O fluxo difusivo de quantidade de movimento na face *Este* do volume de controlo numa malha não-ortogonal é

$$F_{i,e}^d = \int_{S_e} \tau_{ij} \mathbf{i}_j \cdot \mathbf{n} \, dS \approx (\tau_{ij})_e S_e^j. \quad (2.42)$$

Esta expressão inclui três tensões por cada componente Cartesiana da velocidade. Como exemplo, consideremos a equação de transporte na direcção x :

$$F_{u,e}^d = \int_{S_e} \tau_{xj} \mathbf{i}_j \cdot \mathbf{n} \, dS \approx (\tau_{xj})_e S_e^j. \quad (2.43)$$

As tensões podem ser expressas em função das derivadas no referencial não-ortogonal:

$$\begin{aligned} (\tau_{xx})_e &= 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_e = 2\frac{\mu}{J_e} \left(\frac{\partial u}{\partial \xi_i} \beta^{1i} \right)_e, \\ (\tau_{xy})_e &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)_e = \frac{\mu}{J_e} \left(\frac{\partial v}{\partial \xi_i} \beta^{1i} + \frac{\partial u}{\partial \xi_i} \beta^{2i} \right)_e, \\ (\tau_{xz})_e &= \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right)_e = \frac{\mu}{J_e} \left(\frac{\partial w}{\partial \xi_i} \beta^{1i} + \frac{\partial u}{\partial \xi_i} \beta^{3i} \right)_e. \end{aligned}$$

Recorrendo a aproximações idênticas às usadas na discretização do termo difusivo da equação de transporte genérica obtemos,

$$\begin{aligned} (\tau_{xx})_e &\approx 2\frac{\mu}{J_e} \left[\frac{u_E - u_P}{\Delta \xi} \beta_e^{11} + \left(\frac{\delta u}{\delta \eta} \beta^{12} \right)_e + \left(\frac{\delta u}{\delta \zeta} \beta^{13} \right)_e \right], \\ (\tau_{xy})_e &\approx \frac{\mu}{J_e} \left[\frac{v_E - v_P}{\Delta \xi} \beta_e^{11} + \left(\frac{\delta v}{\delta \eta} \beta^{12} \right)_e + \left(\frac{\delta v}{\delta \zeta} \beta^{13} \right)_e + \frac{u_E - u_P}{\Delta \xi} \beta_e^{21} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\delta u}{\delta \eta} \beta^{22} \right)_e + \left(\frac{\delta u}{\delta \zeta} \beta^{23} \right)_e \right], \\ (\tau_{xz})_e &\approx \frac{\mu}{J_e} \left[\frac{w_E - w_P}{\Delta \xi} \beta_e^{11} + \left(\frac{\delta w}{\delta \eta} \beta^{12} \right)_e + \left(\frac{\delta w}{\delta \zeta} \beta^{13} \right)_e + \frac{u_E - u_P}{\Delta \xi} \beta_e^{31} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\delta u}{\delta \eta} \beta^{32} \right)_e + \left(\frac{\delta u}{\delta \zeta} \beta^{33} \right)_e \right]. \end{aligned}$$

O termo do gradiente de pressão é discretizado por:

$$Q_u^p = - \int_S p \mathbf{i} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx - \sum_l p_l S_l^x, \quad (2.44)$$

$$Q_v^p = - \int_S p \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx - \sum_l p_l S_l^y, \quad (2.45)$$

$$Q_w^p = - \int_S p \mathbf{k} \cdot \mathbf{n} \, dS \approx - \sum_l p_l S_l^z, \quad l = e, w, n, s, \dots \quad (2.46)$$

2.3.3 Discretização dos Termos de Corte

Nesta secção descrevemos a discretização dos termos de corte utilizados nas simulações do transporte de escalares passivos na presença de corte, de que damos conta no capítulo 3 desta tese.

O terceiro e o quarto termos da equação (3.2) têm origem no termo advectivo (termo não-linear) na presença de gradiente médio de velocidade:

$$\int_V \rho S x_3 \frac{\partial u_i}{\partial x_1} \, dV = (\rho S x_3 \beta_{11}) \cdot (u_{i,e} - u_{i,w}), \quad (2.47)$$

$$\int_V \rho S u_3 \delta_{i1} \, dV \approx \sum_j \rho S u_{3,P} \delta_{i1} \Delta V^j. \quad (2.48)$$

Os índices e, w representam as faces *Este* e *Oeste* do volume de controlo. Cada factor da equação (2.47) foi tratado separadamente. O primeiro factor foi determinado por:

$$\rho S x_3 \beta_{11} = \rho S \left[(k - 0.5Nk - 0.5) \frac{L}{(Nk - 2)} \right] \frac{L^2}{(Nj - 2)(Nk - 2)}, 2 \leq k \leq Nk - 1, \quad (2.49)$$

onde L é o comprimento do domínio de cálculo, (cubo de aresta π) e Nj e Nk são o número de pontos nas direcções j e k .

As componentes da velocidade na faces *Este* e *Oeste* ($u_{i,e}$ e $u_{i,w}$) são determinadas por interpolação linear, usando os nós P (no centro do volume de controlo), e E e W (a *Este* e *Oeste* de P) de acordo com:

$$\begin{cases} u_{i,e} = \lambda_e u_{i,P} + (1 - \lambda_e) u_{i,E} \\ u_{i,w} = \lambda_w u_{i,P} + (1 - \lambda_w) u_{i,W} \end{cases}, \quad (2.50)$$

onde o coeficiente de interpolação linear λ_e foi definido para malhas cartesianas pela equação (2.28) e para malhas não-ortogonais pela equação (2.30). λ_w foi:

$$\lambda_w = \frac{x_W - x_P}{x_W - x_P}, \quad (2.51)$$

para malhas cartesianas e

$$\lambda_w = \frac{\| \mathbf{x}_W - \mathbf{x}_w \|}{\| \mathbf{x}_W - \mathbf{x}_w \| + \| \mathbf{x}_w - \mathbf{x}_P \|} . \quad (2.52)$$

para malhas não-ortogonais. Quando as malhas forem regularmente espaçadas, $\lambda_e = \lambda_w = 0.5$ e,

$$(u_{i,e} - u_{i,w}) = \frac{1}{2}(u_{i,E} - u_{i,W}) . \quad (2.53)$$

Recorrendo às equações (2.49) e (2.53) obtém-se uma expressão final para o cálculo do termo da equação (2.47),

$$\sum_j \rho S \frac{1}{2} (u_{i,E} - u_{i,W}) \left[(k - 0.5Nk - 0.5) \frac{L^3}{(Nj - 2)(Nk - 2)^2} \right] . \quad (2.54)$$

Tal como na equação de transporte de quantidade de movimento, o uso de gradiente vertical de velocidade e escalar vai dar origem a dois termos adicionais na equação de transporte do escalar: um termo devido ao gradiente médio de velocidade,

$$\int_V \rho S x_3 \frac{\partial \phi}{\partial x_1} dV \approx \sum_j \rho S \frac{1}{2} (\phi_E - \phi_W) \left[(k - 0.5Nk - 0.5) \frac{L^3}{(Nj - 2)(Nk - 2)^2} \right] \quad (2.55)$$

e outro devido ao gradiente médio do escalar,

$$\int_V \rho s u_3 dV \approx \sum_j \rho s u_{3,P} \Delta V^j . \quad (2.56)$$

2.3.4 O Termo de Força

O termo de força enunciado nesta secção foi usado nas simulações descritas no capítulo 3 com as quais estudamos o transporte de escalares passivos em turbulência forçada. Para a obtenção de um campo de velocidades estatisticamente estacionário a turbulência foi forçada, adicionando uma quantidade de energia de valor idêntico à energia dissipada nas pequenas escalas.

Para este efeito, de acordo com o método de Ghosal et al. (1995), uma força externa f_k é adicionada em cada instante, de modo a que a energia cinética da turbulência permaneça constante no tempo,

$$f_k = \frac{\varepsilon}{N_k} \frac{\mathbf{v}_k}{|\mathbf{v}_k|^2} . \quad (2.57)$$

Na equação (2.57) ε é a taxa de injeção de energia, N_k o número de modos de Fourier em que a força é introduzida e \mathbf{v}_k a soma das componentes do vector velocidade nesses

números de onda. A taxa de injeção de energia associada à força é constante e é dada por:

$$\varepsilon = \frac{1}{V} \int_V \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} dV = \sum_k \mathbf{f}_k \cdot \mathbf{v}_k . \quad (2.58)$$

Para melhorar a estabilidade temporal deste método, tal como Eswaran and Pope (1988), em vez de introduzir a energia num único número de onda, optámos por fazê-lo numa gama de números de onda, $0 < k \leq k_F$, em que k_F representa o número de onda máximo da força, definido em função da dimensão do domínio L por $k_F = 4\pi\sqrt{2}/L$. Outra alteração ao método proposto por Ghosal et al. (1995), foi a utilização de uma força f_k , em que todas as componentes foram iguais ao valor médio volumétrico, por forma a preservar a isotropia da turbulência.

Capítulo 3

Transporte de Escalares Passivos em Turbulência Forçada e com Corte e Estratificação Escalar

Resumo do Capítulo

Estudámos a influência do uso de sistemas de coordenadas não-ortogonais e discretização de volumes finitos na simulação numérica directa (DNS—*Direct Numerical Simulation*) do transporte de escalares passivos em turbulência forçada e em decaimento, e em escoamentos sujeitos ao corte e gradiente vertical do campo escalar. Os cálculos foram efectuados num cubo com graus de distorção diversos, com número de Reynolds baseado na microescala de Taylor (R_λ) de 40 e número de Prandtl (Pr) igual a 0.7 e 10. As simulações do transporte de escalares passivos em turbulência forçada revelaram que as distribuições estatísticas do campo escalar, derivadas da velocidade, correlações entre vorticidade e gradiente escalar e correlações entre taxas de deformação e gradiente escalar são invariantes com a distorção da malha. Foram observados, com recurso a iso-superfícies, o alinhamento da vorticidade com as taxas de deformação e a acumulação de escalares em redor de tubos de vórtice. As simulações do transporte de escalares passivos com corte e gradiente vertical do campo escalar mostraram que a componente média da velocidade e do escalar provoca distorção nos respectivos campos na direcção de aplicação do corte, dando origem a estruturas alongadas na mesma direcção, promovendo o crescimento da energia cinética da turbulência face à situação em decaimento. Concluimos que os métodos numéricos utilizados e as aproximações de volumes finitos em malhas não-ortogonais podem ser usadas na simulação deste tipo de escoamentos, com preservação do alinhamento da vorticidade com as taxas de deformação principais e da isotropia dos campos escalar e de velocidade.

3.1 Introdução

A turbulência sem qualquer fonte externa de energia decai por dissipação viscosa. Para forçar a turbulência, podemos actualizar o campo de velocidade em cada instante de tempo de modo que a energia cinética da turbulência permaneça constante. Neste caso, os mecanismos não-lineares de transferência de energia ocorrem em regime permanente, mantendo constante o conteúdo energético associado a cada número de onda. Existem várias formas de forçar a turbulência, como por exemplo, adicionando um termo extra às equações de transporte de quantidade de movimento, equações (3.2). Este termo extra (termo de força) pode ser aleatório, como por exemplo em Biferale and Toschi (2001) ou calculado com base na taxa de dissipação como fizeram Ghosal et al. (1995). Optámos por usar a segunda alternativa, a qual consideramos ter vantagens do ponto de vista numérico e físico. Do ponto de vista numérico pelo facto de ser mais eficiente em termos de tempo de cálculo, apesar de necessitar de uma mudança do espaço físico para o computacional, a qual foi efectuada com recurso a transformadas rápidas de Fourier (FFT–*Fast Fourier Transform*). Do ponto de vista físico, por usar o campo de velocidade e a taxa de dissipação da energia cinética da turbulência em vez de um processo com base em números aleatórios.

O corte e estratificação escalar (gradiente do campo médio da velocidade e do escalar) colocam dificuldades adicionais no que diz respeito às condições de fronteira. Qualquer campo periódico sujeito a efeitos de corte perde a periodicidade; considerando um referencial fixo podemos observar que duas partículas de fluido que no instante inicial ocupam uma dada posição no espaço a diferentes cotas (z), com o decorrer do tempo na presença de corte, vão estar cada vez mais afastadas porque estão animadas de velocidades médias horizontais (U) distintas. Deste modo, o corte implica uma correcção a nível das condições de fronteira, (periódicas na ausência de corte) as quais têm de ser de corte periódico na direcção de aplicação do corte. Optámos pela utilização da condição de fronteira de corte periódico descrita no trabalho realizado por Gerz et al. (1989) pelo facto de esta condição se ter revelado adequada neste tipo de escoamentos.

Muitos escoamentos com interesse em aplicações de engenharia possuem uma direcção preferencial ou ocorrem em geometrias complexas, de modo que o seu estudo pela via computacional nem sempre pode ser efectuada utilizando malhas Cartesianas. O objectivo do trabalho descrito neste capítulo foi o estudo do uso de sistemas de coordenadas não-ortogonais e discretização por volumes finitos na simulação numérica directa (DNS) do transporte de escalares passivos em turbulência forçada e em decaimento, e em escoamentos sujeitos ao corte e gradiente vertical do campo escalar. O trabalho vem dar continuidade ao realizado por Lopes and Palma (2002) no qual foram estudados escoamentos com turbulência isotrópica em decaimento. Aqui mostramos a qualidade das mesmas técnicas numéricas, mas em escoamentos de maior complexidade.

O presente capítulo foi organizado em 5 secções, incluindo esta de introdução e a última, onde apresentamos as principais conclusões. Na secção 3.2 descrevemos o modelo ma-

temático e apresentamos o domínio de cálculo utilizado nas simulações dos escoamentos. Na secção 3.3 analisamos os resultados obtidos nas simulações do transporte de escalares passivos em turbulência forçada e na secção 3.4 analisamos os resultados obtidos nas simulações do transporte de escalares passivos com corte e estratificação escalar.

3.2 Modelo Matemático

O modelo matemático foi constituído pela equação da continuidade (3.1), equações de Navier-Stokes (3.2) e equação de transporte escalar (3.3). Estas equações foram discretizadas usando as técnicas numéricas referidas na secção 2.3 e resolvidas usando a metodologia da simulação numérica directa (DNS).

Para introduzir o efeito do corte e da estratificação escalar foi necessário decompor a componente da velocidade u_i e do escalar ϕ em valor médio e flutuação (decomposição de Reynolds). Assim, os termos não lineares das equações (2.2) e (2.3) dão origem a termos extra nas respectivas equações de transporte, os quais designamos por termos de corte, cuja derivação e adimensionalização apresentamos no apêndice B. Deste modo, o modelo matemático que permite simular o transporte de escalares passivos com corte e gradiente vertical do campo escalar é constituído pela equação da continuidade,

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.1)$$

equações de Navier-Stokes,

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} + S x_3 \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_1} + S \rho u_3 \delta_{i1} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + f_k, \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.2)$$

e a equação de transporte escalar,

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} + S x_3 \frac{\partial \rho \phi}{\partial x_1} + s \rho u_3 = \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (3.3)$$

O terceiro e quarto termos das equações (3.2) e o terceiro termo da equação (3.3) constituem os termos de corte, os três últimos termos das equações (3.2) representam o termo difusivo, de pressão e força, respectivamente e os restantes termos da equação (3.3) são o termo de estratificação escalar e difusivo.

As situações com e sem corte foram distinguidas pelo número de corte adimensional $S = (L/\Delta U)(dU/dz)$, considerando: $S = 1$ e 0 , respectivamente. De igual modo, a estratificação $s_\phi = (L/\Delta \Phi)(d\Phi/dz)$ pode ser instável, neutra e estável, considerando: $s_\phi = -1, 0$ e 1 , respectivamente. L , ΔU e $\Delta \Phi$ são escalas características de comprimento, velocidade e do campo escalar e dU/dz e $d\Phi/dz$ os gradientes verticais médios do campo de velocidade e escalar (figura 3.2).

3.2.1 Domínio de Cálculo

O domínio físico foi um cubo de aresta π cm, discretizado por uma malha igualmente espaçada com 64 pontos em cada direcção Cartesiana. Para estudar os efeitos da não-ortogonalidade da malha, os cálculos foram efectuados num domínio distorcido, onde as direcções computacionais ξ e η coincidem com as direcções físicas x_1 e x_2 , e a direcção física x_3 faz um ângulo α com a direcção computacional ζ (ver figura 3.1). Nestas condições, a matriz da transformação de coordenadas é $B/J = 1/(\Delta \times B_{ij})$, em que $B_{ii} = 1$, $B_{31} = -\tan \alpha$ e os restantes elementos são nulos e J (equação 2.32) e B (equação 2.34) representam o Jacobiano e os seus cofactores numa malha com espaçamento Δ , respectivamente. Esta distorção intencional tem sido usada em trabalhos anteriores por Lopes and Palma (2002) para verificar se o modelo matemático e as técnicas numéricas escolhidas são apropriadas para a simulação das grandes escalas (LES—*Large Eddy Simulation*) em geometrias complexas.

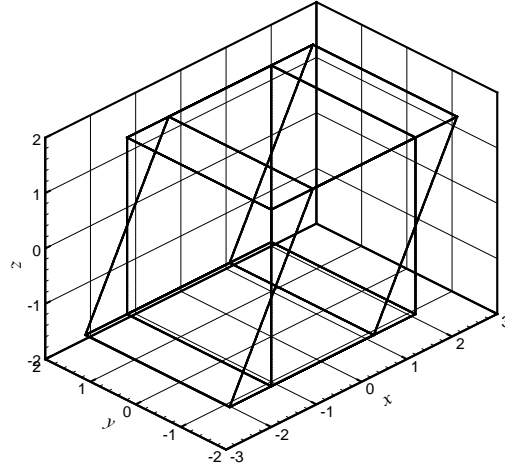


Figura 3.1: Domínio físico, inclinado a 30° entre as direcções z and ζ .

As simulações foram realizadas usando as seguintes condições: a viscosidade cinemática ν foi $0.01189 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ de modo que o número de Reynolds baseado na microescala de Taylor R_λ foi aproximadamente 40. O número de Prandtl Pr utilizado foi igual a 0.4 nas simulações da turbulência forçada e igual a 10 nas simulações com corte e gradiente vertical escalar. Optámos por usar números de Prandtl diferentes porque desta forma aproveitamos para testar o programa de cálculo em situações com maior grau de exigência do ponto de vista numérico, no que diz respeito ao campo escalar. A discretização temporal foi nos dois casos $\Delta t = 0.0004 \text{ s}$.

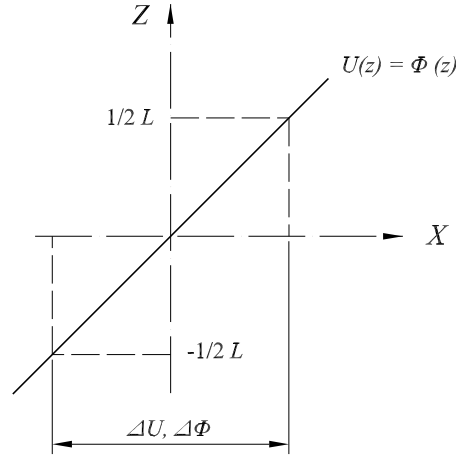


Figura 3.2: Perfis do campo médio de velocidade e escalar.

3.2.2 Campos Iniciais e Condições de Fronteira

As diferenças existentes nos dois problemas apresentados neste capítulo levaram-nos a considerar campos iniciais e condições de fronteira distintas. Nas simulações do transporte de escalares passivos em turbulência forçada, cuja análise dos resultados efectuamos na secção 3.3, usamos campos iniciais aleatórios, isotrópicos, com distribuições estatísticas Gaussianas e com o seguinte espectro:

$$E(k) = Ak^4 \exp(-Bk^2), \quad (3.4)$$

onde A e B são definidos tais que $\int E(k)dk = 3/2 \text{ cm}^2\text{s}^{-2}$ e o máximo de $E(k)$ ocorre para $k_p = 2^{9/4} \text{ cm}^{-1}$. As condições de fronteira foram periódicas nas três direcções Cartesianas.

Para gerar os campos iniciais utilizamos o gerador de números aleatórios **RANO**, descrito no capítulo 7 do livro “*Numerical Recipes in FORTRAN*” (Press et al., 1993). Este método, por comparação com os outros algoritmos descritos no mesmo livro, constitui um bom compromisso entre a qualidade dos campos obtidos e o tempo de computação necessário. Utilizámos a distribuição das flutuações da velocidade e da vorticidade pelas três componentes Cartesianas para investigar se os campos iniciais tinham as características pretendidas. Estas duas quantidades são consideradas medidas da isotropia das grandes e pequenas escalas, respectivamente.

Nas simulações do transporte de escalares passivos com corte e estratificação escalar, cuja análise dos resultados efectuamos na secção 3.4, a componente média da velocidade horizontal e do escalar têm um gradiente constante e uniforme relativamente à direcção vertical z , como mostra a figura 3.2. Neste problema os campos iniciais também foram aleatórios, isotrópicos e apresentaram distribuições Gaussianas com o seguinte espectro:

$$E(k) = \frac{\overline{u_i u_i}}{4\pi} \frac{k}{k_p^2} e^{-k/k_p}, \quad (3.5)$$

onde $\overline{u_i u_i} = 2.703 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-2}$ são as tensões de Reynolds e o máximo de $E(k)$ ocorre para $k_p = 6 \text{ cm}^{-1}$. O corte exige correcções a nível das condições de fronteira do escoamento face ao problema anterior. Assim, as condições de fronteira foram de corte periódico na direcção do corte e periódicas nas restantes direcções. Para descrever o procedimento utilizado nas condições de fronteira na direcção do corte, vamos considerar uma flutuação genérica $f \in \{u_i, \phi, p\}$:

$$f(t, x_1 + m_1, x_2 + m_2, x_3 + m_3) = f(t, x_1 - S m_3 \Delta t, x_2, x_3), \quad (3.6)$$

onde m_i é um inteiro arbitrário e $(x_1, x_2, x_3) \cong (x, y, z)$. A variável f no nó 1 é transportada uma distância igual a $S x_3^1 \Delta t$ (x_3^1 representa o valor da coordenada $x_3 \cong z$ no nó 1). Atendendo a que o novo valor de f no nó 1 deriva do valor de f no nó $Nk - 1$ e devido ao corte a variável f no nó $Nk - 1$ é transportada $S x_3^{Nk-1} \Delta t$ (x_3^{Nk-1} representa o valor da coordenada $x_3 \cong z$ no nó $Nk - 1$), significa que o valor corrigido de f no nó 1 é $S(x_3^1 - x_3^{Nk-1}) \Delta t$. Isto corresponde à aplicação de dois *shift*: um para anular o efeito do corte no nó $Nk - 1$ e outro para aplicar a condição de fronteira devido ao corte no nó 1. Para a condição de fronteira no nó Nk procedeu-se do mesmo modo. Assim, as condições de fronteira aplicadas no espaço de Fourier foram:

$$f(t, I, J, 1) = f(t, I, J, Nk - 1) e^{-i \times shift}, \quad f(t, I, J, Nk) = f(t, I, J, 2) e^{i \times shift}, \quad (3.7)$$

onde,

$$shift = 2\pi \kappa S \underbrace{(x_3^1 - x_3^{Nk-1})}_L \frac{\Delta t}{L} = 2\pi(I - 1)S \Delta t. \quad (3.8)$$

3.3 Transporte de Escalares Passivos em Turbulência Forçada: Análise dos Resultados

Apresentamos nas sub-secções seguintes a evolução temporal de diversos parâmetros estatísticos, cujo principal objectivo foi mostrar a possibilidade de utilização de aproximações de volumes finitos em malhas não-ortogonais, sem prejuízo para a qualidade da solução destes problemas.

Para estudar a isotropia dos campos iniciais em malhas não-ortogonais foram estabelecidos três critérios: $\langle u_i^2 \rangle / \sum_j \langle u_j^2 \rangle$; $\langle \omega_i^2 \rangle / \sum_j \langle \omega_j^2 \rangle$ e $\langle \omega^2 \rangle / \langle \text{tr}(\mathcal{S}^2) \rangle$ (tabela 3.1). No caso do campo ser isotrópico, os dois primeiros critérios são iguais a $1/3$ e o terceiro igual a 2 . Verificamos que as componentes da velocidade mais anisotrópicas são a componente v e w , com aproximadamente 12% de anisotropia. No caso da vorticidade, a componente ω_x em malhas não-ortogonais a 45° é de todas a mais anisotrópica e regista uma anisotropia de aproximadamente 6%. As diferenças registadas nos resultados do cálculo dos três critérios de isotropia para os diversos domínios de integração, repartidos pelas três componentes Cartesianas, não mostraram qualquer desvio sistemático, deveram-se à circunstância dos

$\angle(z, \zeta)$	$\langle u_i^2 \rangle / \sum_j \langle u_j^2 \rangle$	$\langle \omega_i^2 \rangle / \sum_j \langle \omega_j^2 \rangle$	$\langle \omega^2 \rangle / \langle \text{tr}(\mathcal{S}^2) \rangle$
0°	0.334; 0.292; 0.373	0.353; 0.323; 0.323	2.000
15°	0.334; 0.292; 0.373	0.353; 0.323; 0.324	2.000
30°	0.334; 0.292; 0.373	0.353; 0.323; 0.324	2.000
45°	0.334; 0.292; 0.373	0.352; 0.322; 0.326	1.998

Tabela 3.1: Isotropia dos campos no instante $t = 0$ s.

pontos da malha corresponderem a localizações no espaço físico diferentes e à necessidade da continuidade ser satisfeita no espaço discreto. Os resultados da tabela 3.1 mostram também que a isotropia dos campos de velocidade não é afectada pelo facto de a malha ser não-ortogonal, verificando-se resultados coincidentes até à terceira casa decimal. No caso do campo de vorticidade os resultados revelam uma diferença a nível da terceira casa decimal, sendo máxima na componente ω_z para 45° na ordem de 0.28%, não tendo sido atribuída particular importância a este desvio.

Atendendo à análise efectuada aos resultados da tabela 3.1, concluímos que os campos iniciais utilizados apresentavam características isotrópicas e o procedimento de cálculo que converte os campos para malhas não-ortogonais preserva a isotropia dos campos de velocidade e vorticidade.

3.3.1 Energia Cinética da Turbulência e Variância Escalar

Em turbulência com decaimento a energia cinética decresce por dissipação viscosa, enquanto que em turbulência forçada a energia dissipada nas pequenas escalas é re-introduzida à mesma taxa pela força nas grandes escalas, mantendo os níveis de turbulência aproximadamente constantes ao longo do tempo, como mostra a figura 3.3a.

Considerando a situação ortogonal como padrão (linha contínua), verificamos que a situação mais energética no final da simulação $t = 0.8$ s, ocorre para o caso de 15° de inclinação com mais 1.4% de energia. A situação menos energética é a situação de 30° com um desvio de 2.1%, enquanto que a situação de 45° tem um desvio de 1.7%. Estas diferenças entre domínios são semelhantes àsquelas encontradas em trabalho anterior realizado por Lopes and Palma (2002), e não têm consequências nos parâmetros mais importantes deste tipo de escoamento.

Importa também conhecer a evolução temporal da variância escalar, a qual representamos na figura 3.3b. Neste caso verificamos que a força f_k e o uso de malhas não ortogonais não produzem alterações a nível do transporte escalar e que a dissipação da variância escalar ocorre a escalas temporais menores do que a dissipação da quantidade de movimento, dado que são necessários apenas cerca de 0.4 s para a dissipação de 70% do campo escalar. De notar também que, ao contrário da energia cinética da turbulência, a variância escalar

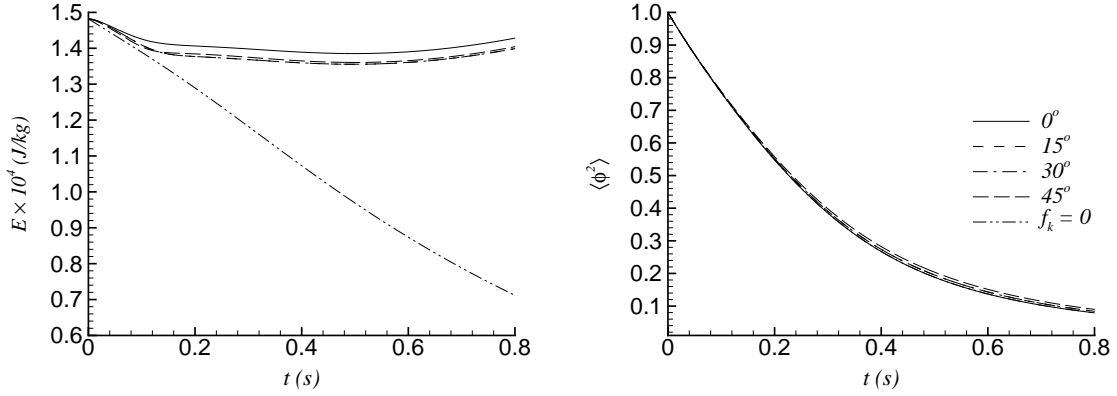


Figura 3.3: Evolução temporal da energia cinética da turbulência (a) e da variância escalar (b), em turbulência forçada.

decai ao longo do tempo.

Se analisarmos a equação de transporte da variância escalar (cf. Bradshaw, 1978; Tennekes and Lumley, 1999),

$$\frac{d\frac{1}{2}\overline{\phi^2}}{dt} = - \underbrace{\overline{u_j \phi} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j}}_{P_\phi} - \underbrace{\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \phi}{\partial x_j}}_{\varepsilon_\phi} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\overline{u_j \phi^2}}{2} - \Gamma \frac{\partial \overline{\phi^2}/2}{\partial x_j} \right), \quad (3.9)$$

podemos ver que não existe produção P_ϕ porque o gradiente médio espacial escalar $\partial \Phi / \partial x_j$ é nulo. Assim, apenas existe o termo difusivo (responsável pela re-distribuição escalar) e o termo dissipativo ε_ϕ , sendo este último o responsável pelo decaimento da variância escalar ao longo do tempo (quanto maior a difusividade maior a taxa de decaimento da variância escalar).

3.3.2 Momentos Estatísticos de Terceira e Quarta Ordem

De acordo com Kerr (1985), podem definir-se três tipos de *skewness* (coeficiente de assimetria ou momentos estatísticos de terceira ordem); com base nas derivadas da velocidade $S_{\partial u / \partial x}$, derivadas do escalar $S_{\partial \phi / \partial x}$ e derivadas mistas $S_{\partial u / \partial x \cdot \partial \phi / \partial x}$:

$$S_{\partial u / \partial x} = \frac{\left\langle \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^3 \right\rangle}{\left\langle \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle^{\frac{3}{2}}}; \quad S_{\partial \phi / \partial x} = \frac{\left\langle \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right)^3 \right\rangle}{\left\langle \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle^{\frac{3}{2}}} \quad \text{e} \quad S_{\partial u / \partial x \cdot \partial \phi / \partial x} = \frac{\left\langle \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle}{\left\langle \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}} \left\langle \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle}. \quad (3.10)$$

Utilizámos estes momentos estatísticos para medir a isotropia das pequenas escalas do campo de velocidade, do campo escalar e dos fluxos escalares, respectivamente. Se estivermos em presença de campos de velocidade e escalar Gaussianos, as *skewness* (da velocidade, escalar e mistas) são nulas. Como podemos observar na figura 3.4, no instante inicial as *skewness* são aproximadamente zero (campos Gaussianos) mas com o decorrer do tempo o seu valor aumenta. Isto significa que os campos de velocidade e escalar perderam a simetria inicial, o que aliás também é visível nas PDF representadas nas figuras 3.6a e 3.7b.

Todas as *skewness* estabilizam por volta dos 0.2 s (figura 3.4), com excepção das *skewness* das derivadas do escalar, sendo que estas pelos 0.4 s apresentam um comportamento diferenciado para malhas não-ortogonais (devido à baixa variância do escalar, aproximadamente 25% do valor inicial, nesse instante), mostrando que a anisotropia das pequenas escalas do campo escalar pode apresentar alterações provocadas pelo aumento da distorção da malha.

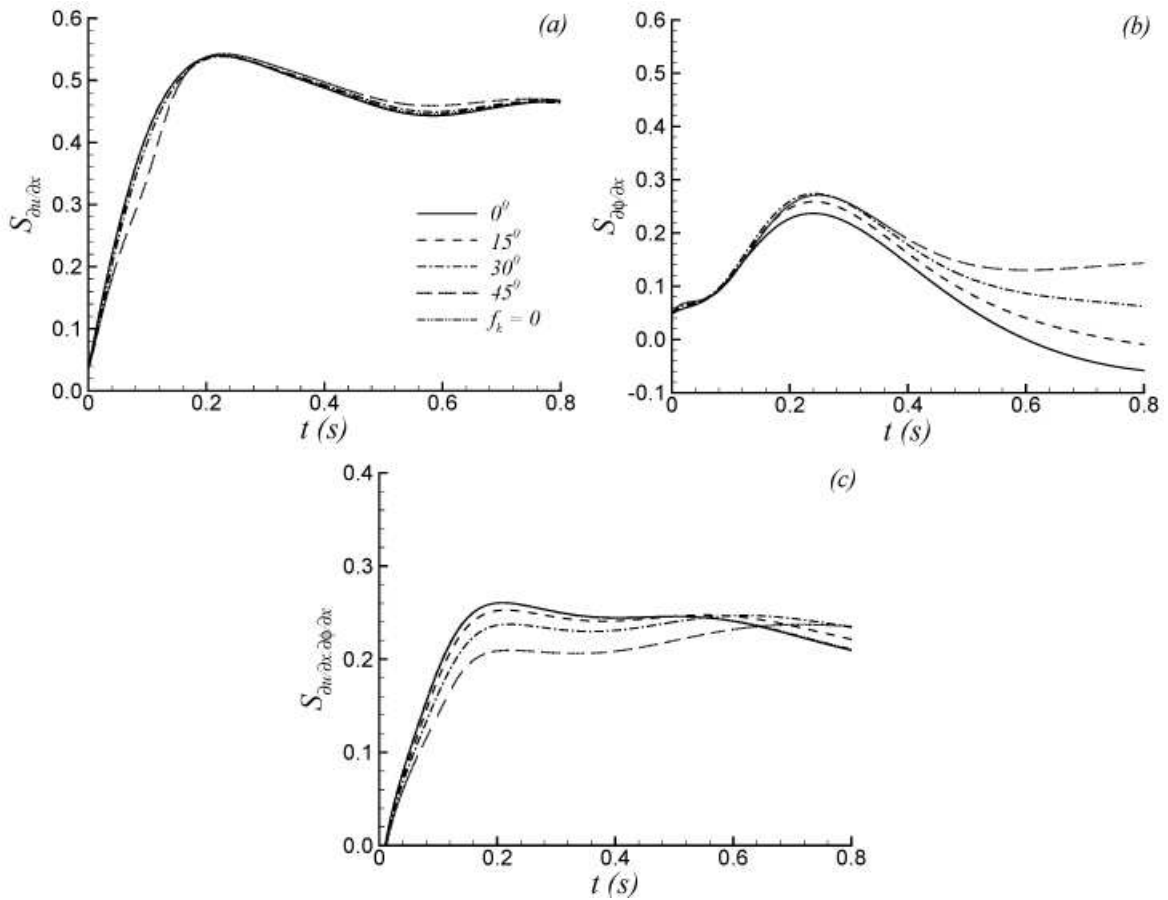


Figura 3.4: *Skewness* das derivadas longitudinais (a) da velocidade, (b) do campo escalar e (c) das derivadas mistas.

Os 0.2 s representam o tempo necessário para que as estatísticas estabilizem, após o qual um estado dito estatisticamente estacionário é alcançado. A estes 0.2 s de intervalo de tempo no início das simulações corresponde um período de inicialização, no qual temos campos aleatórios que satisfazem as equações do movimento, mas não representam fisicamente a turbulência.

Do mesmo modo, podemos definir os momentos estatísticos de quarta ordem *flatness* (coeficiente de achatamento) conforme a equação (3.11). O coeficiente de achatamento das derivadas da velocidade $F_{\partial u/\partial x_i}$ revela como a vorticidade se alinha com as taxas de deformação, enquanto que o coeficiente de achatamento das derivadas do escalar $F_{\partial \phi/\partial x_i}$ indica como o gradiente escalar se orienta relativamente às taxas de deformação. O alinhamento relativo do gradiente escalar com a vorticidade é determinado pela *flatness* das derivadas mistas $F_{\partial u/\partial x \cdot \partial \phi/\partial x}$.

$$F_{\partial u/\partial x} = \frac{\left\langle \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^4 \right\rangle}{\left\langle \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle^2}; \quad F_{\partial \phi/\partial x} = \frac{\left\langle \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right)^4 \right\rangle}{\left\langle \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle^2} \quad \text{e} \quad F_{\partial u/\partial x \cdot \partial \phi/\partial x} = \frac{\left\langle \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle}{\left\langle \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle \left\langle \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right)^2 \right\rangle}. \quad (3.11)$$

No caso de distribuições Gaussianas, o valor da *flatness* das derivadas da velocidade e do escalar é igual a 3, enquanto que para as derivadas mistas a *flatness* é igual a 1. A figura 3.5 reforça a natureza Gaussiana dos campos iniciais e a evolução para campos turbulentos não Gaussianos, tal como no caso das *skewness* da figura 3.4.

O comportamento diferenciado das *skewness* e *flatness* das derivadas do campo escalar das figuras 3.4b e 3.5b pode ter duas interpretações: ou estamos perante um problema intrínseco ao campo escalar e ao escoamento ou o campo escalar coloca exigências acrescidas do ponto de vista numérico e de discretização que o campo de velocidade não revela. A segunda hipótese parece-nos, neste caso, pouco provável quando analisamos o comportamento das *skewness* e *flatness* das derivadas mistas (figuras 3.4c e 3.5c), as quais apresentam uma evolução temporal praticamente invariante com a não-ortogonalidade da malha.

Contudo, estudos de natureza numérica (e.g., Holzer and Siggia, 1994) e experimental (e.g., Sreenivasan et al., 1979; Mydlarski and Warhaft, 1998) anteriormente efectuados, haviam já mostrado um comportamento diferenciado entre o campo escalar e o campo de velocidade. Estes trabalhos revelaram, recorrendo a funções de estrutura e às *skewness* das derivadas do campo escalar, que o campo escalar é anisotrópico nas escalas de inércia e dissipativas. Mais recentemente Kang and Meneveau (2001) estudaram a anisotropia do campo escalar, utilizando medições de um escoamento turbulento sobre um cilindro aquecido e confirmaram a anisotropia do campo escalar em todas as escalas presentes no escoamento. Mydlarski (2003) estudou escoamentos com corte e gradiente escalar, recorrendo a medições em túnel de vento e mostrou que os escoamentos não apresentavam isotropia local.

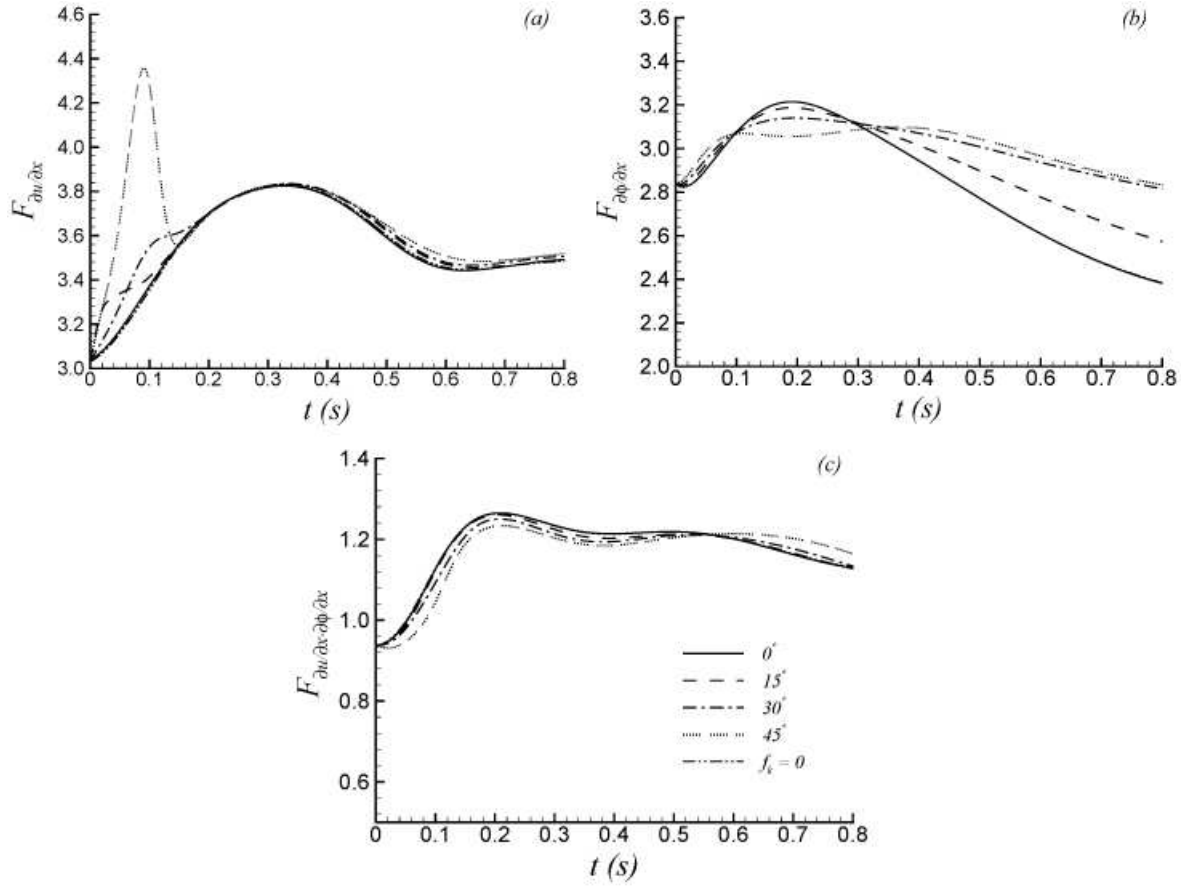


Figura 3.5: *Flatness* das derivadas longitudinais (a) da velocidade, (b) do campo escalar e (c) das derivadas mistas.

Tendo em conta os resultados dos estudos que acabamos de referenciar, considerámos esclarecido o comportamento diferenciado das *skewness* e *flatness* das derivadas do campo escalar presente nas simulações que efectuámos.

3.3.3 Isotropia dos Campos

Para verificar se a força f_k preserva a isotropia dos campos, usámos a distribuição das flutuações das três componentes Cartesianas da velocidade e da vorticidade, no início e no final da simulação. Utilizou-se a distribuição das flutuações da velocidade e da vorticidade pelo facto de serem consideradas medidas da isotropia das grandes e das pequenas escalas, respectivamente. Além disso, uma vez que os efeitos da não-ortogonalidade da malha se faziam sentir através das derivadas, a vorticidade era um bom parâmetro para os avaliar.

A relação isotrópica

$$\langle \omega^2 \rangle / \langle \text{tr}(\mathcal{S}^2) \rangle = 2, \quad (3.12)$$

$\angle(z, \zeta)$	$\langle u_i^2 \rangle / \sum_j \langle u_j^2 \rangle$	$\langle \omega_i^2 \rangle / \sum_j \langle \omega_j^2 \rangle$	$\langle \omega^2 \rangle / \langle \text{tr}(\mathcal{S}^2) \rangle$
0°	0.342; 0.317; 0.340	0.345; 0.328; 0.327	2.000
15°	0.342; 0.318; 0.340	0.345; 0.328; 0.327	2.000
30°	0.342; 0.318; 0.340	0.346; 0.326; 0.328	2.000
45°	0.344; 0.318; 0.339	0.349; 0.323; 0.329	2.000

Tabela 3.2: Isotropia dos campos no instante $t = 0.8$ s.

em que $\text{tr}(\mathcal{S}^2) = \sum S_{ij}S_{ji}$, representa o traço do tensor quadrado das taxas de deformação, também foi verificada. Observando os resultados das tabelas 3.1 e 3.2, conclui-se que a isotropia dos campos foi preservada no decorrer das simulações, em malhas Cartesianas e em malhas não-ortogonais. A componente Cartesiana da velocidade v foi a mais anisotrópica e ocorreu em malhas cartesianas. No caso da vorticidade, ω_x foi a componente mais anisotrópica e ocorreu em malhas não-ortogonais com 45° de inclinação. Em qualquer dos casos a anisotropia foi sempre inferior a 5%, o que nos permite concluir que o método utilizado para forçar a turbulência não provoca anisotropia no campo de resultados.

3.3.4 Funções Densidade de Probabilidade

As distribuições estatísticas das derivadas da velocidade e escalar foram estudadas usando as suas funções densidade de probabilidade (PDF—*Probability Density Function*). Estas mostraram ser aproximadamente Gaussianas, consequência do processo usado para gerar os campos iniciais.

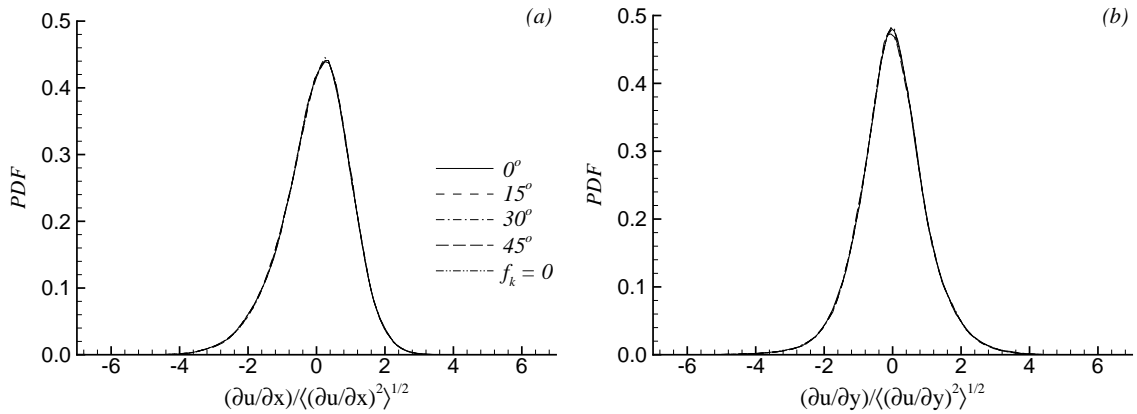


Figura 3.6: PDF normalizadas do campo das derivadas da velocidade (a) longitudinal e (b) transversal, no instante $t = 0$ s.

Quaisquer efeitos da não-ortogonalidade da malha fazem-se sentir através do cálculo das derivadas. Estas foram calculadas de forma diferenciada para malhas Cartesianas e malhas

não-ortogonais: para calcular uma derivada relativamente a uma das direcções Cartesianas, calculavam-se as derivadas relativamente às direcções computacionais e efectuava-se a transformação de coordenadas (2.33). As figuras 3.6 e 3.7a mostram que todas as simulações apresentam campos com PDF das derivadas (da velocidade e do escalar) coincidentes.

As PDF da figura 3.7a revelam que a distorção da malha não influencia a forma como é gerado o campo escalar inicial (as PDF obtidas em malhas Cartesianas são coincidentes com as obtidas em malhas não-ortogonais). Pela figura 3.7b, verificamos que este método de forçar a turbulência não interfere no desenvolvimento do campo escalar.

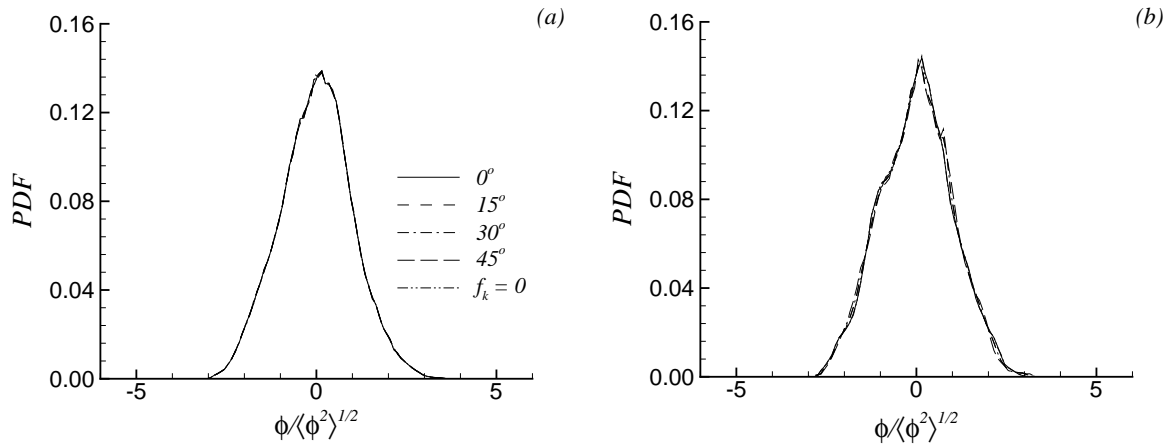


Figura 3.7: PDF normalizadas do campo escalar (a) no instante $t = 0$ s e (b) no instante $t = 0.8$ s.

3.3.5 Correlações entre Gradiente Escalar, Vorticidade e Taxas de Deformação

Vamos agora considerar as correlações entre vorticidade ω e derivadas do escalar e vorticidade e taxas de deformação e_{ij} , em que $e^2 = \sum e_{ij}^2$:

$$F_{\nabla\phi\omega 1} = \frac{\langle (\nabla\phi)^2 \omega^2 \rangle}{\langle (\nabla\phi)^2 \rangle \langle \omega^2 \rangle}; \quad F_{\nabla\phi\omega 2} = 3 \frac{\langle (\nabla\phi \cdot \omega)^2 \rangle}{\langle (\nabla\phi)^2 \rangle \langle \omega^2 \rangle}; \quad (3.13)$$

$$F_{\nabla\phi e 1} = \frac{\langle (\nabla\phi)^2 e^2 \rangle}{\langle (\nabla\phi)^2 \rangle \langle e^2 \rangle} \quad \text{e} \quad F_{\nabla\phi e 2} = 3 \frac{\left\langle \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \cdot e_{ij} e_{jk} \frac{\partial\phi}{\partial x_k} \right\rangle}{\langle (\nabla\phi)^2 \rangle \langle e^2 \rangle}. \quad (3.14)$$

Embora seja pouco comum, estas correlações foram normalizadas de forma a que o valor não-correlacionado seja igual a 1 (cf. Kerr, 1985).

A correlação $F_{\nabla\phi\omega 1}$ está representada na figura 3.8 e é aproximadamente 1, mostrando que há uma pequena correlação entre a magnitude da vorticidade e o gradiente escalar. A

correlação $F_{\nabla\phi\omega 2}$, com valores da ordem de 0.7 mostra a baixa correlação entre a direcção da vorticidade e a direcção do gradiente escalar, com o escalar acumulado ao redor dos tubos de vórtice. Ambas as correlações entre as taxas de deformação e as derivadas do escalar, $F_{\nabla\phi e1}$ e $F_{\nabla\phi e2}$, são maiores do que 1, permanecendo constantes ou crescendo ligeiramente no tempo.

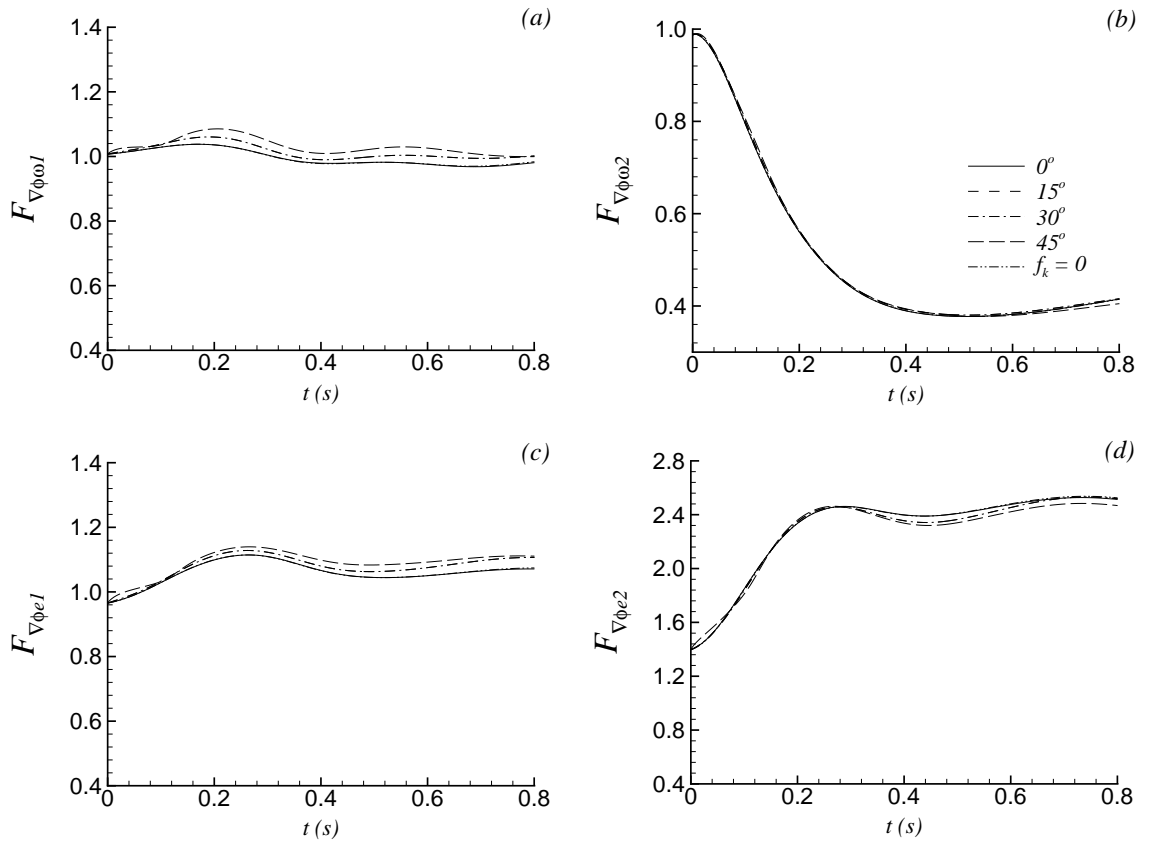


Figura 3.8: Correlações entre gradiente escalar e vorticidade (a) e (b); correlações entre gradiente escalar e taxas de deformação (c) e (d).

A figura 3.9 mostra o alinhamento entre o gradiente escalar e as taxas de deformação (figura 3.9b) e a acumulação do gradiente escalar em redor dos tubos de vórtice (figura 3.9a), tal como Kerr (1985) tinha concluído com base na determinação das correlações das equações (3.13) e (3.14) e que nos conduziram a resultados idênticos (figura 3.8).

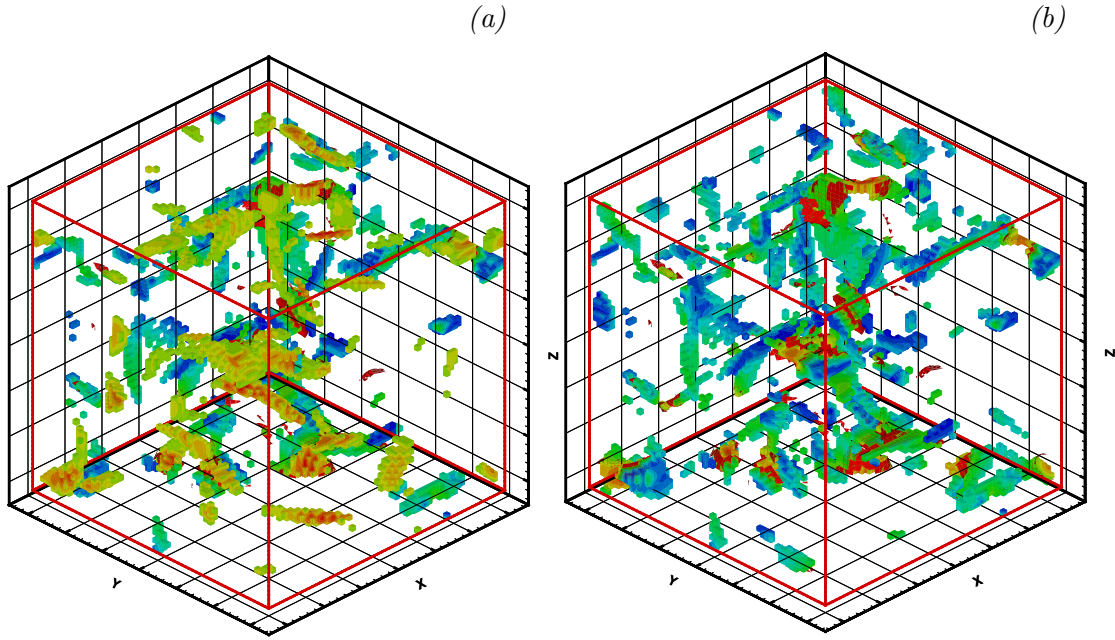


Figura 3.9: Iso-superfícies 3D do gradiente escalar (azul e verde) com a vorticidade (vermelho e amarelo) (a) e do gradiente escalar (azul e verde) com as taxas de deformação (azul escuro vermelho e amarelo) (b).

3.4 Transporte de Escalares Passivos com Corte e Estratificação Escalar: Análise dos Resultados

Nas sub-seções seguintes apresentamos a evolução temporal da energia cinética da turbulência, da variância escalar e dos fluxos escalares. Estas quantidades foram calculadas para malhas ortogonais, no caso da turbulência em decaimento e em malhas ortogonais e não-ortogonais (a 15°, 30° e 45°) em turbulência com corte e gradiente vertical do campo escalar. As equações de transporte foram usadas na análise dos resultados e são as seguintes:

$$\frac{dE}{dt} = -S\overline{uw} - \epsilon \quad (3.15)$$

$$\frac{d\overline{\phi^2}}{dt} = -2s\overline{w\phi} - \epsilon_{\phi\phi} \quad (3.16)$$

$$\frac{d\overline{u\phi}}{dt} = -s\overline{uw} - S\overline{w\phi} + P_{1\phi} - \epsilon_{1\phi} \quad (3.17)$$

$$\frac{d\overline{w\phi}}{dt} = -s\overline{ww} + P_{3\phi} - \epsilon_{3\phi} \quad (3.18)$$

onde,

$$\epsilon_{ij} = \frac{2}{Re} \overline{\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k}}, \quad \epsilon_{i\phi} = \frac{1 + Pr}{RePr} \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k}}, \quad \epsilon_{\phi\phi} = \frac{2}{RePr} \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x_k} \frac{\partial \phi}{\partial x_k}} \quad \text{e} \quad \epsilon = \epsilon_{ii}/2, \quad (3.19)$$

são, respectivamente, as taxas de dissipação das tensões de Reynolds, dos fluxos escalares e da variância escalar,

$$P_{i\phi} = \overline{p \frac{\partial \phi}{\partial x_i}} \quad (3.20)$$

são as correlações pressão-escalar. A barra sobre qualquer quantidade indica as médias de Reynolds.

3.4.1 Energia Cinética da Turbulência e Variância Escalar

A figura 3.10 evidencia os efeitos da presença dos gradientes médios da velocidade e escalar, através dos valores mais elevados de energia cinética da turbulência e da variância escalar em relação ao caso sem gradiente médio ($Shear = 0$). Este resultado é a consequência dos termos de corte nas equações (3.2) e (3.3) (e igualmente nas equações (3.15) e (3.16)), os quais dependem do gradiente de velocidade S e do gradiente escalar s_ϕ e contribuem para o aumento das flutuações de velocidade e do escalar passivo. Quanto aos aspectos numéricos,

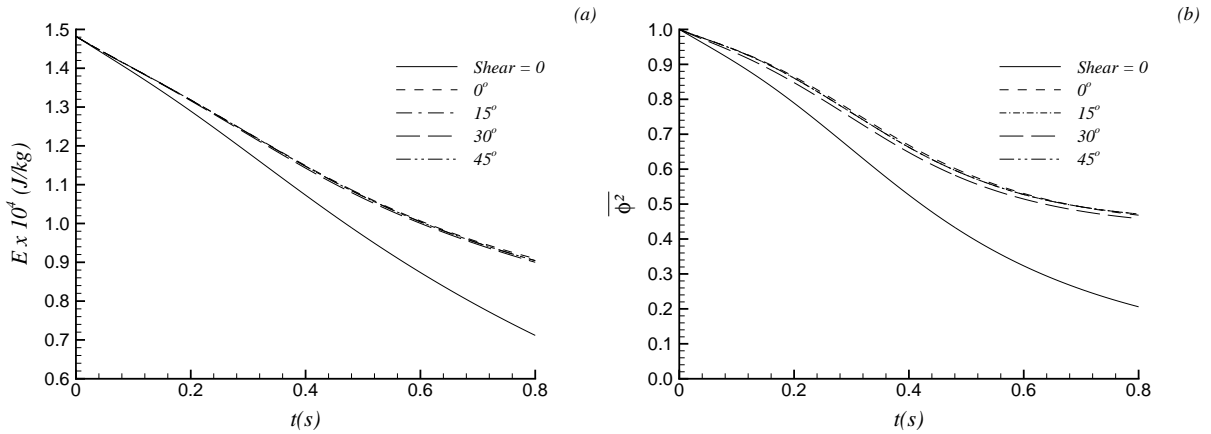


Figura 3.10: Energia cinética da turbulência (a) e variância escalar (b), perante o corte.

note-se que a inclinação do domínio de integração não afecta a variação temporal destas quantidades, o que constitui uma primeira prova de que o modelo matemático e as técnicas numéricas utilizadas são adequados para a resolução deste problema.

3.4.2 Campo de Velocidade no Plano de Corte

A figura 3.11 mostra como o campo de velocidade é alterado pela existência do gradiente médio de velocidade, considerando os campos de velocidade em instantes sucessivos no plano de corte médio xz . As estruturas do campo de velocidade são transportadas na direcção x pela componente média U da velocidade, apresentando velocidades mais elevadas nos pontos localizados a cotas z maiores, sendo estiradas na direcção x . Cada uma das estruturas maiores que se vêem na figura 3.11a foi decomposta em várias estruturas de menor área superficial alongadas na direcção x (ilustrando a cascata de energia) tal como mostram sobretudo a figura 3.11c e a figura 3.11d nas regiões com maior velocidade média (cotas z mais elevadas).

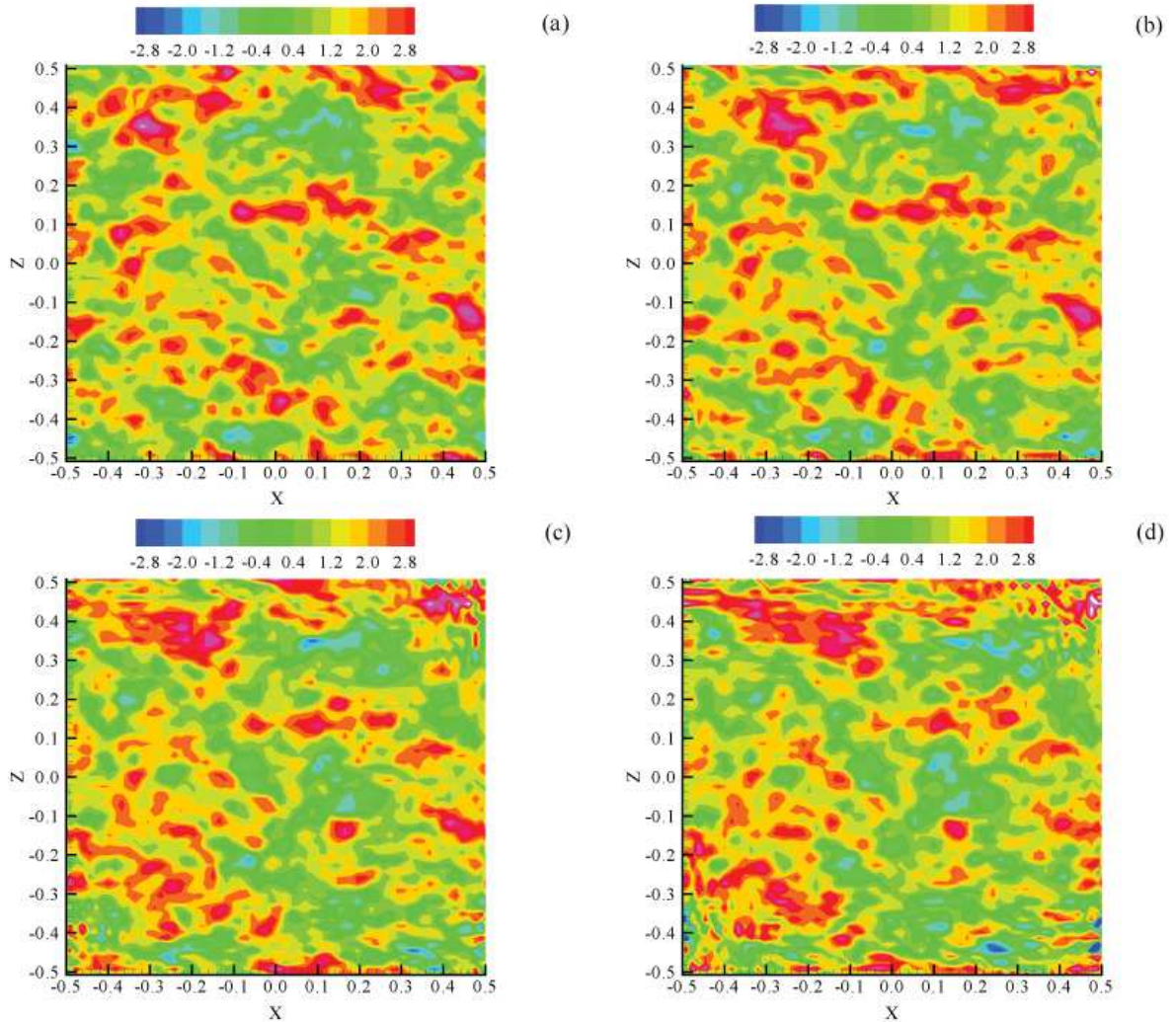


Figura 3.11: Campo de velocidade no plano de corte xz em malhas ortogonais (a) para $t = 0.2$ s, (b) $t = 0.4$ s, (c) $t = 0.6$ s e (d) para $t = 0.8$ s.

3.4.3 Campo Escalar no Plano de Corte

Fazendo o mesmo tipo de representação que efectuámos para a velocidade (figura 3.11) mas agora para o campo escalar, podemos ver na figura 3.12 que as estruturas escalares são também transportadas e distorcidas à medida que a simulação avança no tempo. O mesmo tipo de representação para os domínios não-ortogonais mostrou que não existem diferenças associadas à distorção do domínio de integração. As figuras para malhas não-ortogonais não foram aqui representadas pelo facto de não acrescentarem informação relevante à figura 3.12.

Comparando as figuras 3.11 e 3.12, verificam-se algumas diferenças entre os campos de velocidade e escalar: no caso dos campos de velocidade, o corte provoca alterações nos campos alongando as estruturas na direcção x , enquanto que no caso do campo escalar a inclinação das estruturas provocada pelos gradientes de velocidade e escalar é de aproximadamente 45° . Outra observação que podemos fazer da figura 3.12 diz respeito aos cantos do domínio de cálculo onde a velocidade é a mais elevada. Nestes pontos, as estruturas escalares apresentam um padrão diferente do resto do domínio e importa compreender a origem desta alteração local nas estruturas escalares. A evolução temporal dos fluxos escalares no plano de corte xz representada na figura 3.13, mostra que no caso da turbulência em decaimento (linha contínua) os fluxos $\overline{u\phi}$ e $\overline{w\phi}$ apresentam intensidade idêntica. No caso dos escoamentos sujeitos ao corte e gradiente escalar vertical por volta dos 0.2 s, o fluxo $\overline{u\phi}$ aumenta continuamente com o decorrer do tempo da simulação, enquanto que o fluxo $\overline{w\phi}$ apresenta uma assíntota horizontal. Deste modo, com o decorrer da simulação o fluxo $\overline{u\phi}$ é cada vez mais predominante e as estruturas nas zonas de maior velocidade vão sendo acumuladas nos cantos do domínio de cálculo.

Pensamos que esta alteração local nas estruturas do campo escalar pode ser uma característica particular do campo escalar neste escoamento e que tem pouca influência nos resultados pelo facto de ser local, de corresponder a uma pequena fracção do domínio de cálculo e de não ocorrer em todo o tempo de integração. Contudo, não é de excluir trate-se de um problema numérico que possa ser resolvido utilizando um esquema de discretização para o campo escalar mais adequado.

3.4.4 Fluxos Escalares

Comparando as simulações dos escoamentos com e sem corte, pode ver-se na figura 3.13 que perante a presença de corte os fluxos turbulentos da flutuação escalar $\overline{u\phi}$ e $\overline{w\phi}$ são mais elevados. Os fluxos $\overline{u\phi}$ e $\overline{w\phi}$ comportam-se de forma diferente e o aumento de intensidade de $\overline{u\phi}$ é explicado pela forma das equações (3.17) e (3.18), onde observamos que no caso de $\overline{u\phi}$ o corte (S) contribui para o fluxo $\overline{u\phi}$ através da sua interacção com \overline{uw} e $\overline{w\phi}$, enquanto que no caso $\overline{w\phi}$ isso acontece apenas com \overline{ww} .

Podemos ainda ver na figura 3.13 o efeito da não-ortogonalidade da malha na evolução

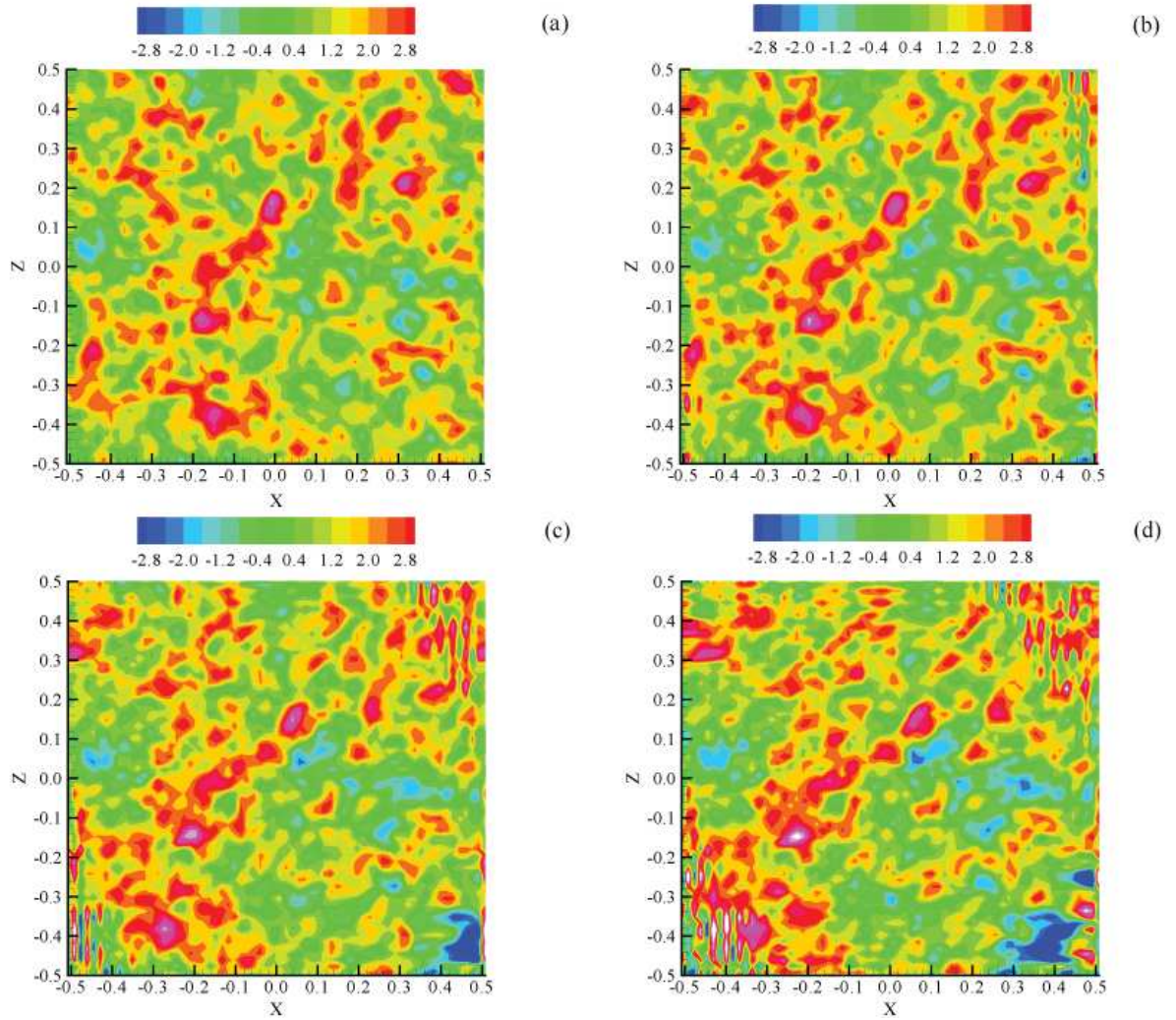


Figura 3.12: Campo escalar no plano de corte xz em malhas ortogonais (a) para $t = 0.2$ s, (b) $t = 0.4$ s, (c) $t = 0.6$ s e (d) para $t = 0.8$ s.

temporal dos fluxos escalares $\overline{u\phi}$ e $\overline{w\phi}$: as diferenças maiores ocorrem entre as malhas ortogonais e as malhas não-ortogonais inclinadas a 30° e são de 12% no fluxo $\overline{u\phi}$ e 7% no fluxo $\overline{w\phi}$.

3.4.5 Momentos Estatísticos

Os momentos estatísticos de terceira e quarta ordem foram calculados para malhas ortogonais e não-ortogonais utilizando as equações (3.10) e (3.11) e representados nas figuras 3.14 e 3.15, respectivamente.

A *skewness* das derivadas longitudinais da velocidade diminui cerca de 13% passando

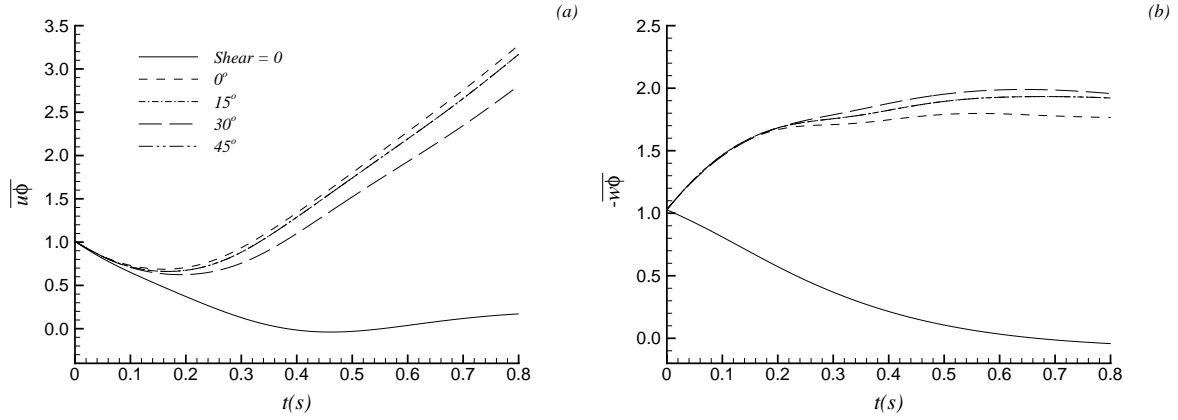


Figura 3.13: Evolução temporal dos fluxos escalares $\overline{u_i \phi}$ para α igual a 0° , 15° , 30° e 45° .

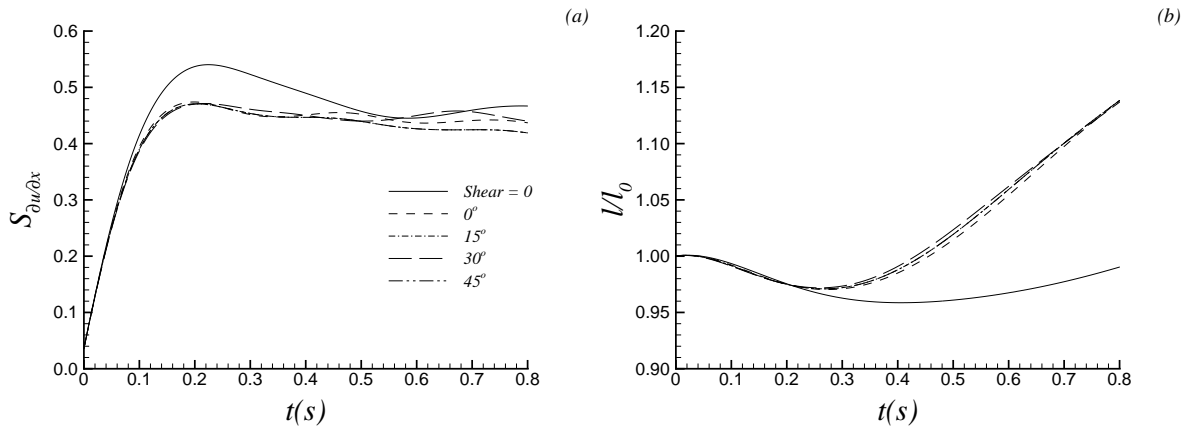


Figura 3.14: (a) *Skewness* das derivadas longitudinais da velocidade, (b) escala integral adimensionalizada pelo valor inicial.

de uma situação de turbulência em decaimento para uma situação com corte, mas a não-ortogonalidade da malha não influenciou o desenvolvimento temporal das derivadas da velocidade, bem como a evolução da escala integral ($l = k^{3/2}/\epsilon$) representada na figura 3.14b a qual aumenta até atingir mais cerca de 15% do seu valor inicial ao fim de 0.8 s. As diferenças observadas a nível das *skewness* das derivadas do campo de velocidade, revelam que o uso de malhas não-ortogonais em escoamentos com corte provoca ligeiras alterações na isotropia das pequenas escalas.

As figuras 3.15a e 3.15b mostram que as *flatness* das derivadas longitudinais da velocidade e campo escalar assumem valores entre de 3 e 3.5, típicos para turbulência homogênea. No caso do campo escalar, o valor da *flatness* é mais elevado por comparação com o campo de velocidade, o que significa que existe um maior alinhamento entre o gradiente escalar e as taxas de deformação do que entre a vorticidade e as taxas de deformação. Ao anali-

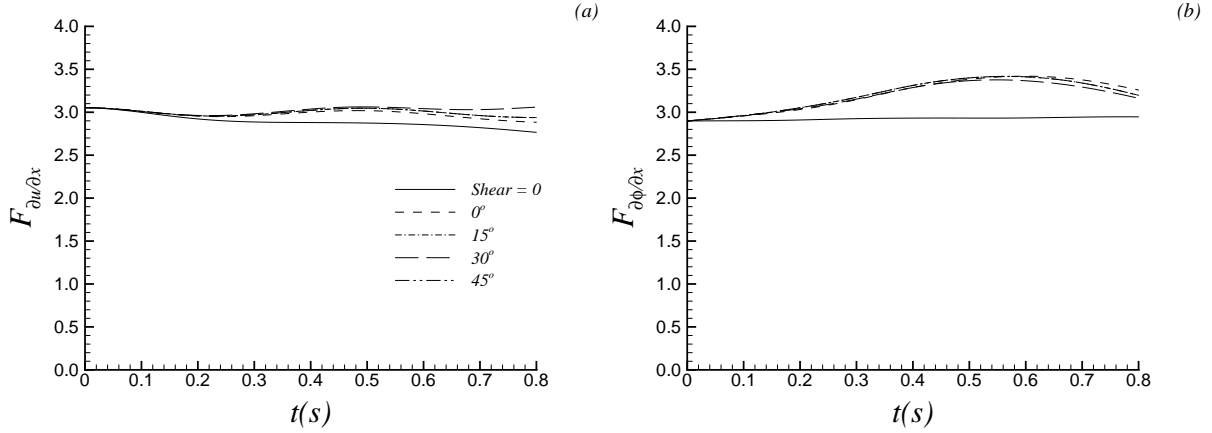


Figura 3.15: *Flatness* das derivadas longitudinais (a) da velocidade, (b) do campo escalar.

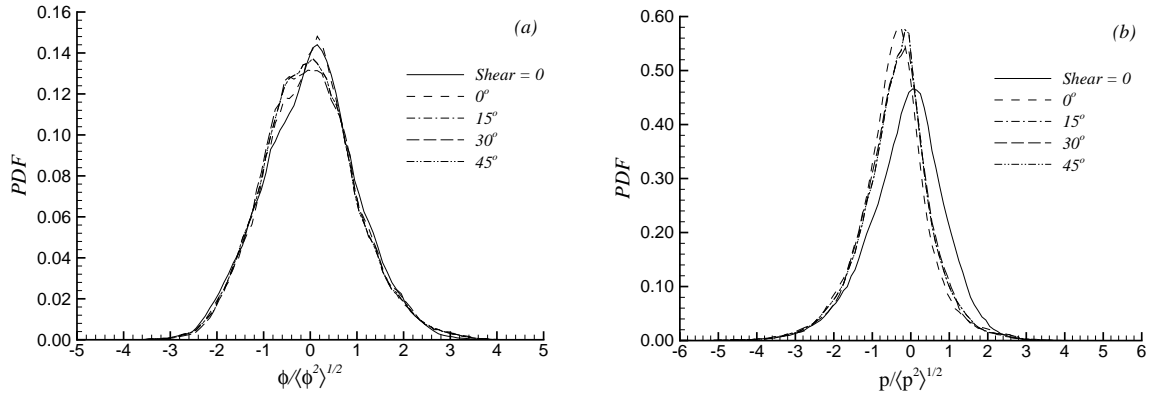


Figura 3.16: PDF normalizadas (a) do campo escalar (b) do campo de pressão, no instante $t = 0.8$ s.

sarmos os resultados das *flatness* calculadas a partir de campos de velocidade e escalar obtidos em malhas não-ortogonais, verificamos que estes são aproximadamente iguais.

3.4.6 Funções Densidade de Probabilidade

As funções densidade de probabilidade (PDF–*Probability Density Function*) das derivadas da velocidade, campo escalar e campo de pressão, são aproximadamente Gaussianas, como também acontece em problemas de turbulência homogênea, ainda que estejamos na presença de gradientes de velocidade e escalar numa única direcção.

Nem o uso de malhas não ortogonais nem o corte e estratificação escalar interferiram

na evolução das PDF do campo escalar (figura 3.16a). As PDF da pressão (figura 3.16b), são invariantes com o uso de malhas não-ortogonais, porém, o valor do pico é 26% superior na presença de corte face à situação em decaimento. O corte provoca ainda alterações a nível do campo de pressão de modo que as PDF ficam descentradas da origem.

3.5 Conclusões

O objectivo do trabalho descrito neste capítulo foi estudar a influência da não-ortogonalidade da malha e discretização por volumes finitos na simulação numérica directa (DNS) do transporte de escalares passivos em turbulência forçada, em decaimento e com corte e gradiente vertical do campo escalar.

Os resultados obtidos nas simulações do transporte de escalares passivos em turbulência forçada mostraram que a não-ortogonalidade da malha não modificou a isotropia dos campos nem o alinhamento do gradiente escalar com a vorticidade e as taxas de deformação principais. Foi possível observar a acumulação de escalares em redor de tubos de vórtice e o alinhamento da vorticidade com as taxas de deformação principais. Todas as funções densidade de probabilidade (PDF) obtidas em domínios não-ortogonais se sobrepuseram dando origem a uma PDF única e a isotropia dos campos de velocidade e escalar foi preservada.

As simulações do transporte de escalares passivos em escoamentos com corte e gradiente vertical do campo escalar mostraram que a componente média da velocidade e escalar provoca distorções nos respectivos campos, dando origem a estruturas alongadas na direcção do corte. A intensidade do campo turbulento, devido à acção dos gradientes do campo médio de velocidade e do escalar, aumenta à medida que a solução avança no tempo, registando uma diferença máxima entre malhas não-ortogonais na ordem dos 10%. Também neste caso, as diversas estatísticas calculadas mostraram que o efeito do corte é o mesmo quando usamos malhas ortogonais ou não-ortogonais.

Os resultados permitem concluir que a não-ortogonalidade da malha não influenciou os resultados das simulações e as metodologias usadas neste trabalho podem ser estendidas a problemas mais complexos do ponto de vista físico e geométrico, nomeadamente transporte de escalares activos, na presença de corte e curvatura.

Capítulo 4

Simulação de um Escoamento Turbulento num Canal com Curvatura e Corte

Resumo do Capítulo

O objectivo do trabalho descrito neste capítulo foi através da simulação das grandes escalas da turbulência (LES—*Large Eddy Simulation*) de um escoamento no interior de um canal com curvatura e gradiente vertical de velocidade (do qual dispomos de resultados experimentais para a validação das simulações), estudar a forma mais adequada de simular este tipo de escoamentos, e conhecer melhor os efeitos do corte e da curvatura na turbulência. Nas fronteiras superior e inferior do canal usou-se a condição de escorregamento livre, na direcção transversal condições periódicas, e na saída condição convectiva discretizada através do método de Euler explícito. A condição de entrada foi gerada usando três formas distintas, as quais se vão aproximando da condição experimental, tentando reproduzir a física do escoamento: a primeira foi baseada em números aleatórios e distribuição Gaussiana; a segunda condição usa também um campo com distribuição Gaussiana mas permite correlacionar as diversas componentes das tensões de Reynolds; e a terceira condição foi obtida a partir de um campo desenvolvido numa simulação prévia usando um cubo de turbulência isotrópica. Para estudar o efeito do corte (zona recta do canal) e o efeito combinado da curvatura e corte (zona curva do canal) na turbulência, calculamos as tensões de Reynolds ao longo da direcção longitudinal do canal. Na zona recta, as tensões de Reynolds crescem fruto de uma transferência de energia do campo médio para o campo turbulento por acção do corte. Na zona curva o crescimento das tensões de Reynolds é mais acentuado devido ao aumento da intensidade da turbulência provocado pela curvatura nas linhas de corrente.

4.1 Introdução

Os escoamentos com curvatura são problemas importantes no contexto de escoamentos com corte, têm sido motivo de vários estudos e alguns dos efeitos da curvatura na turbulência já são conhecidos. Trabalhos anteriores mostraram que quando a quantidade de movimento angular aumenta devido ao aumento do raio de curvatura, a turbulência diminui, diz-se neste caso que a curvatura desempenha um papel *estabilizador* na turbulência. Por outro lado, quando a quantidade de movimento angular diminui devido ao aumento do raio de curvatura, a turbulência aumenta, diz-se neste caso que a curvatura desempenha um papel *desestabilizador* na turbulência. Do mesmo modo, por comparação com uma parede plana, uma parede convexa desempenha um papel *estabilizador* na camada de limite turbulenta, enquanto que uma parede côncava desempenha um papel *desestabilizador*.

Vários trabalhos de natureza experimental que abordaram o problema do corte e curvatura foram publicados durante a década de setenta e oitenta. Estes trabalhos apresentam algumas limitações no estudo de escoamentos com corte *puro*, uma vez que a existência de camada limite nas paredes tem sido uma dificuldade para os trabalhos de natureza experimental. Holloway and Tavoularis (1992) apresentaram uma solução hábil para diminuir o efeito da camada limite nas suas medições, construindo um degrau na secção recta do canal. Esta solução para além de não conseguir eliminar a presença da camada limite, apresenta dificuldades a nível do campo médio (o qual era não uniforme) e em garantir um gradiente de pressão nulo nas secções curvas do canal. Com a simulação deste escoamento pretendemos eliminar a interacção destes factores e estudar os efeitos da curvatura e do corte *puro* na turbulência.

O objectivo do trabalho descrito neste capítulo foi, utilizando o programa de cálculo previamente desenvolvido baseado na simulação das grandes escalas da turbulência (LES), o estudo da forma mais adequada para a simulação de um escoamento com corte e curvatura, do qual dispomos de resultados experimentais de Holloway and Tavoularis (1992) para validação do modelo matemático e técnicas numéricas utilizadas, visando a simulação de escoamentos com curvatura e contra-curvatura. Este escoamento faz parte de um trabalho levado a efeito no âmbito AGARD (1998), que tinha como objectivo principal identificar os estudos experimentais e numéricos mas importantes no apoio ao desenvolvimento da simulação computacional em Mecânica do Fluidos, nomeadamente na validação de modelos LES. É um escoamento cuja simulação coloca dificuldades acrescidas, por exemplo, na geração da condição de entrada. Por outro lado, o elevado número de Reynolds, bem como o corte e a curvatura acentuada, tornam a simulação deste escoamento um teste exigente para os métodos numéricos utilizados. Por se tratar de um escoamento sem camada limite, este escoamento tem a vantagem de o modelo computacional não necessitar de uma malha refinada junto às paredes para a resolução da camada limite.

O presente capítulo foi organizado em 4 secções, incluindo esta de introdução e a última onde apresentamos as conclusões. Na secção 4.2 descrevemos o modelo matemático uti-

lizado nas simulações efectuadas e apresentamos o domínio de cálculo e as condições de fronteira do escoamento. Os resultados foram apresentados na secção 4.3, a qual foi organizada em 4 subsecções: nas subsecções 4.3.1 a 4.3.3 estudamos o efeito do tempo de integração, do grau de refinamento da malha e da condição de entrada nos resultados das simulações, usando um canal plano e as mesmas condições do escoamento do canal com curvatura; na subsecção 4.3.4 estudamos os efeitos do corte e da curvatura na turbulência, confrontando os resultados numéricos de LES com os resultados experimentais de Holloway and Tavoularis (1992).

4.2 Modelo Matemático e Técnicas Numéricas

Na simulação das grandes escalas da turbulência (LES), o campo de velocidade é decomposto em campo resolvido (grandes escalas) e campo de sub-malha (pequenas escalas). As equações usadas para o campo resolvido foram a equação da continuidade (2.9) e equações de Navier-Stokes (2.10), as quais foram discretizadas usando as técnicas numéricas referidas na secção 2.3. As tensões de sub-malha τ_{ij} que contabilizam o efeito das escalas de sub-malha nas escalas resolvidas, foram modeladas pelo modelo dinâmico Lagrangeano proposto por Meneveau et al. (1996), descrito na secção 2.2.2.

4.2.1 Domínio de Cálculo e Condições de Fronteira

As equações do movimento foram resolvidas em duas geometrias distintas: num canal plano e num canal com curvatura. O canal plano foi usado para estimar o grau de refinamento da malha, verificar a importância do tempo de integração e compreender a resposta do programa a condições de entrada distintas. Este canal tinha 1 m de comprimento com secção transversal rectangular de altura $2h_{in} = 0.24$ m e largura πh_{in} (h_{in} representa a semialtura do canal) e foi discretizado usando uma malha regularmente espaçada em cada uma das direcções coordenadas x , y e z , a que corresponde a direcção longitudinal, vertical e transversal, respectivamente. O canal curvo representado na figura 4.1, ($S_0 = h_{in}$, $S_1 = 1.78$ m, $R_c = 2$ m e $\theta = 1$ rad) apenas diferiu do canal plano na direcção longitudinal. A malha usada tinha $225 \times 64 \times 64$ nós, uniforme nas direcções vertical e transversal e com uma expansão de 5% na direcção longitudinal próximo da saída. O estudo sobre a estabilidade da condição de saída apresentado no apêndice A, permitiu aferir a importância do uso de uma expansão na malha para melhorar a estabilidade na saída.

A condição de fronteira para a entrada foi obtida numa simulação prévia usando como domínio de cálculo um cubo de turbulência homogénea com 32^3 e 64^3 pontos, onde utilizámos campos iniciais aleatórios, isotrópicos e com distribuição Gaussiana, gerados de acordo com o método de Rogallo (Schumann, 1985), com tensões de Reynolds iguais aos valores obtidos no trabalho experimental por Holloway and Tavoularis (1992) e com o

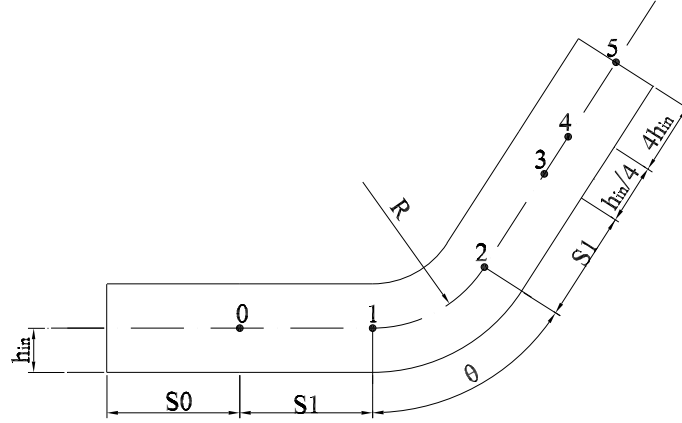


Figura 4.1: Geometria do canal com curvatura, com secção de entrada, curva e secção de saída.

seguinte espectro de energia:

$$E(\kappa) = \frac{\kappa}{2\pi\kappa_p^2} \exp\left(-\frac{\kappa}{\kappa_p}\right), \quad (4.1)$$

onde κ representa o número de onda e κ_p o número de onda do pico de energia. Esta forma de gerar um campo turbulento necessitou de uma resolução temporal de 0.2 s para que os momentos estatísticos estabilizassem em valores típicos, tal como descrito na secção 3.3.2 do capítulo 3. O espectro de flutuações de velocidade obtido na simulação prévia foi adicionado ao campo de corte médio do escoamento no canal.

Nas fronteiras inferior e superior do canal usou-se a condição de escorregamento livre. Esta condição permite economizar recursos porque não necessitamos de refinar a malha junto às fronteiras para resolver o desenvolvimento da camada limite e permite simplificar o problema do ponto de vista físico, tornando possível estudar de forma isolada e em simultâneo o efeito do corte e da curvatura na turbulência.

Na saída utilizámos a condição convectiva de Orlanski (1976) discretizada através do método de Euler explícito. O estudo do comportamento de diversas condições de saída usadas na simulação de um escoamento turbulento com corte e curvatura (apresentado no apêndice A), revelou que esta seria a forma mais adequada de impedir que as instabilidades geradas na saída fossem reflectidas para montante por intermédio da pressão. Para melhorar o desempenho da condição de saída, usámos um troço adicional no domínio de cálculo com comprimento igual a $4h_{in}$ onde a malha apresenta uma expansão de 5% para evitar que qualquer perturbação possa alterar os resultados na região de interesse.

É prática comum na simulação de escoamentos turbulentos em canais utilizando a metodologia LES (e.g., Lopes et al. (2003) e Piomelli and Balaras (2002)) usarem-se condições periódicas na direcção transversal z .

4.3 Análise dos Resultados

Estudámos o efeito do tempo de integração, da malha e da condição de entrada na solução do problema. Para tal, efectuaram-se simulações em canal plano (mais rápidas do que as simulações no canal com curvatura) perante as mesmas condições de entrada do trabalho experimental.

4.3.1 Período Usado para o Cálculo das Médias

O primeiro ponto de análise deste trabalho foi estudar o efeito do instante inicial usado para o cálculo das médias. Considerámos sempre o mesmo campo turbulento para a entrada, obtido numa simulação prévia num cubo de turbulência isotrópica, com tensões de Reynolds: $uu = 0.175$; $vv = 0.079$; $ww = 0.117$ e $uv = 0.059$ iguais aos valores do trabalho experimental de Holloway and Tavoularis (1992). A malha usada no canal foi regularmente espaçada com cerca de 123 mil pontos ($120 \times 32 \times 32$) e o incremento temporal foi de 10^{-3} s.

Atendendo a que o canal considerado tinha 1 m de comprimento, uma partícula a viajar à velocidade média de 10 m/s demoraria 0.1 s a atravessar o canal. Porém, e perante as condições de teste em que consideramos um gradiente vertical de velocidade de 6.25 s^{-1} , observou-se que a turbulência demora 1 s (10 vezes mais) a ter efeito na saída do canal. Isto significa que as flutuações turbulentas são transportadas a uma velocidade 10 vezes inferior à velocidade média e a escala temporal do escoamento é $\tau_e = 1$ s.

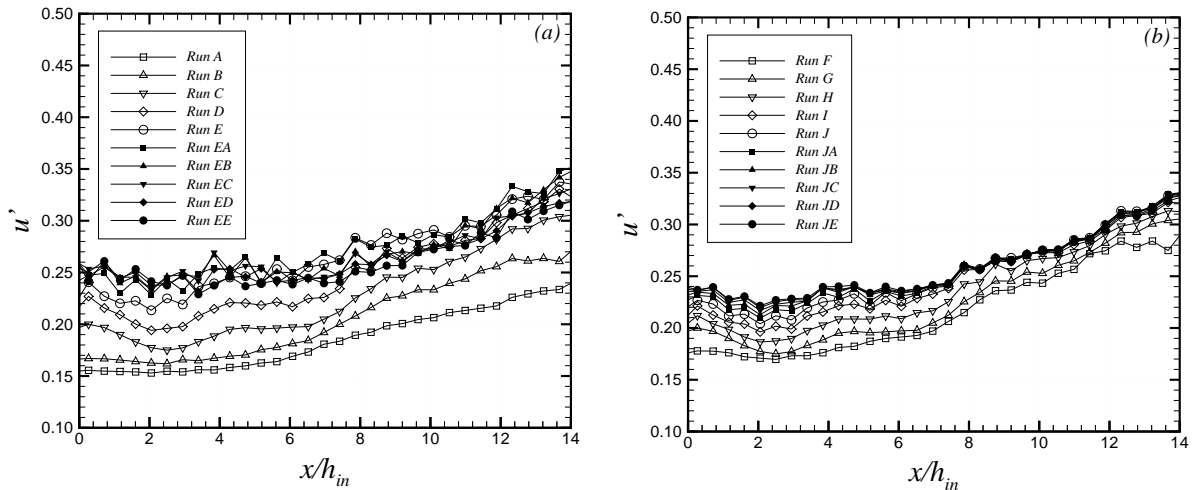


Figura 4.2: Valor *r.m.s* da velocidade u' : (a) usando diferentes tempos de início das médias, (b) fazendo médias durante intervalos de tempo diferentes.

Efectuaram-se 10 simulações, descritas na tabela 4.1, em que o instante de início das

Malha: $120 \times 32 \times 32$; $\Delta t = 10^{-3}$ s; $Re_b = 68000$

Simulação	τ_i/τ_e	τ_f/τ_e	Simulação	τ_i/τ_e	τ_f/τ_e
Run A	2	4	Run F	4	5
Run B	3	5	Run G	4	6
Run C	4	6	Run H	4	7
Run D	5	7	Run I	4	8
Run E	6	8	Run J	4	9
Run EA	7	9	Run JA	4	10
Run EB	8	10	Run JB	4	11
Run EC	9	11	Run JC	4	12
Run ED	10	12	Run JD	4	13
Run EE	11	13	Run JE	4	14

1 s \simeq 21.25min CPU; P IV 3.2Ghz 2Gb RAM (Dell Precision 360)

Tabela 4.1: Condições de teste para estudar o efeito do instante de início e final no cálculo das médias.

médias τ_i variou entre 2 e 11 segundos, calculando médias durante 2 segundos em cada simulação. τ_f representa o instante final utilizado para o cálculo das médias. Representamos na figura 4.2a, ao longo do eixo x do canal, o valor *r.m.s* da velocidade $u' = [2/3k]^{1/2}$. $k = 1/2(u^2 + v^2 + w^2)$ representa a energia cinética das flutuações turbulentas por unidade de massa. O cálculo de u' foi efectuado usando os pontos situados sobre a linha de eixo do canal. Verificamos que a partir da simulação *Run E*, os valores de u' não modificam significativamente à medida que iniciamos as médias mais tarde, o que permite concluir que este instante é um bom momento para iniciar as médias e corresponde a 6 tempos característicos.

Para ajustar o tempo de integração durante o qual é indicado fazer médias, considerámos um tempo de início das médias correspondente a 4 s, fazendo variar o tempo de duração das médias de 1 s até 10 s, tal como apresentamos na tabela 4.1. Os resultados obtidos, representados na figura 4.2b, revelaram que a partir da simulação *Run J*, a que corresponde um período de duração das médias de 5 s, o escoamento atingiu um estado estatisticamente estacionário e podemos terminar o cálculo das médias.

4.3.2 Influência da Malha nos Resultados

Com o objectivo de averiguar o grau de refinamento da malha, efectuaram-se as simulações descritas na tabela 4.2. O estudo partiu de uma malha com $120 \times 32 \times 32$, considerada nesta secção como referência, e que serviu de base ao estudo das médias. A malha foi refinada numa primeira situação na direcção do escoamento, mantendo a resolução na direcção transversal, seguida de um refinamento na direcção transversal para cada resolução na

direcção longitudinal.

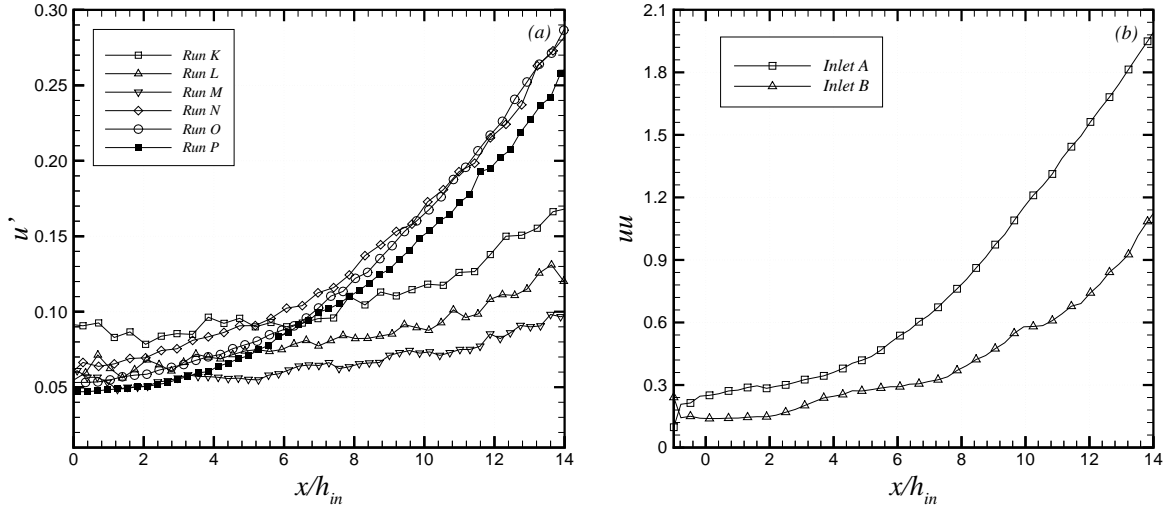


Figura 4.3: Valor *r.m.s* da velocidade u' para diferentes malhas (a) e tensão de Reynolds para duas condições de entrada (b).

Da figura 4.3a podemos concluir que: aumentando a resolução na direcção do escoamento, a intensidade da turbulência u' diminui de forma visível quando utilizámos 32×32 nós na direcção transversal, o que significa que, para obter resultados semelhantes, seria necessário aumentar o número de nós na direcção do escoamento. Quando usámos 64×64 nós na direcção transversal, o refinamento na direcção do escoamento tem menos importância. O uso de malhas mais finas na direcção transversal obrigou à diminuição em uma ordem de grandeza do passo no tempo, Δt . Atendendo a que o canal com curvatura tem um comprimento maior do que o canal plano, optámos por utilizar nas simulações de canal com curvatura uma malha com mais nós ($225 \times 64 \times 64$), para garantir o mesmo grau de refinamento na direcção longitudinal do que o usado no canal plano.

4.3.3 A Resposta da Condição de Entrada

O campo de velocidade foi decomposto em campo médio, U , V , W , e flutuações, u , v , w , paralelas às direcções s , n e z , respectivamente (decomposição de Reynolds). O campo médio de velocidade (figura 4.4), pode ser representado matematicamente por,

$$(U, V, W) = \left(U_c + \frac{dU}{dn}n, 0, 0 \right), \quad (4.2)$$

onde U_c é a velocidade na linha de eixo do canal, assumida constante. Para o campo turbulento considerámos três condições. A de menor complexidade representa cada uma

Médias: 6 – 12[s] $Re_b = 68000$		
Simulação	Malha	Tempo de CPU [min]
Run K	$120 \times 32 \times 32$	255
Run L	$150 \times 32 \times 32$	360
Run M	$185 \times 32 \times 32$	420
Run N	$120 \times 64 \times 64$	1620
Run O	$150 \times 64 \times 64$	1740
Run P	$185 \times 64 \times 64$	1860
P IV 3.2Ghz 2Gb RAM (Dell Precision 360)		

Tabela 4.2: Condições de teste para estudar o efeito do refinamento da malha nos resultados.

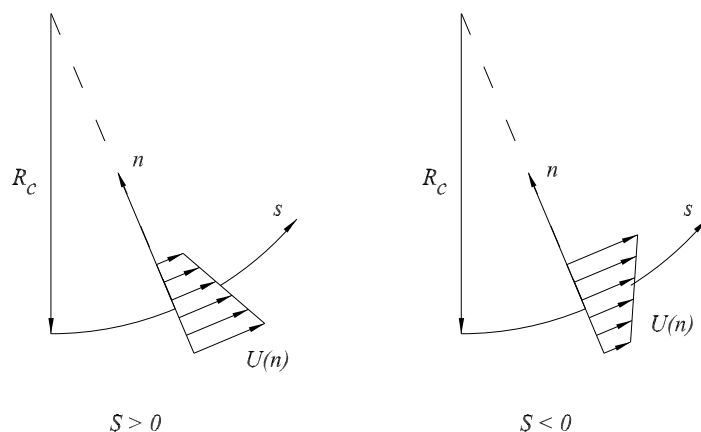


Figura 4.4: Representação esquemática do campo de corte médio com curvatura.

das flutuações u , v , w por um campo Gaussiano (Inlet A). É uma forma simples de tratar a condição de entrada, a qual se mostrou útil no desenvolvimento do programa de cálculo, mas que não permite representar com rigor toda a física do escoamento. A segunda condição (Inlet B) foi a condição de Lund et al. (1998) que melhora a condição anterior porque permite obter campos turbulentos com determinadas correlações entre as diversas componentes do tensor de Reynolds. Por último, obtivemos um campo turbulento numa simulação prévia usando como domínio de cálculo um cubo de turbulência isotrópica, com e sem corte na direcção vertical (Inlet C). O método que recorre a uma simulação prévia, ao contrário dos anteriores, permite definir alguns parâmetros físicos, como por exemplo, estabelecer o número de Reynolds bem como os momentos estatísticos do campo turbulento obtido.

A procura de métodos para estabelecer a condição de entrada tem motivado diversos estudos (e.g., Lund et al., 1998; Keating et al., 2004). No entanto, este continua a ser um problema em aberto. Um estudo recente realizado por Keating et al. (2004) em que

foram analisadas algumas formas de gerar condições de entrada com camada limite, mostrou a complexidade que existe e a inadequabilidade de alguns métodos em reproduzir uma condição de entrada. A evolução longitudinal do coeficiente de atrito, da energia cinética turbulenta e das tensões de corte, por comparação com uma simulação que usa condições periódicas na direcção do escoamento, demonstraram que estas quantidades sofrem variações importantes numa secção na entrada que pode ter um comprimento igual a 10 alturas do canal plano.

Outra dificuldade na geração da condição de entrada, para além de conseguir um campo turbulento para o primeiro plano que seja próximo do trabalho experimental, é conseguir que os planos seguintes sejam coerentes com o primeiro. Pela figura 4.3b, verificamos que a correlação existente entre as flutuações turbulentas varia significativamente à medida que avançamos para montante (na direcção do escoamento). Foram exploradas algumas tentativas para minimizar este problema, entre as quais, o refinamento da malha nos planos transversal e longitudinal, o uso de uma condição de entrada para a pressão de extrapolação linear e condição de entrada para a velocidade, obtida a partir de um campo periódico vindo do interior do canal de uma posição $x = h_{in}$ em 128 instantes sucessivos. Contudo, estas tentativas não resolveram por completo as dificuldades com a condição na entrada. Deste modo, mesmo considerando uma secção de entrada com o objectivo de permitir que as tensões de Reynolds estabilizem, é sempre uma dificuldade, ajustar por tentativas as diversas tensões de Reynolds com os respectivos valores experimentais.

No entanto, não ficamos impedidos de estudar o efeito do corte e da curvatura na turbulência, apenas a validação é dificultada quando pretendemos usar resultados experimentais. No caso do trabalho experimental existe também dificuldade em obter um campo turbulento com determinadas características, mas como não é feita uma comparação com outros resultados, o problema não se coloca.

4.3.4 O Efeito da Curvatura e do Corte na Turbulência

Fazendo uso das condições estudadas nas secções anteriores, efectuou-se a simulação do caso NA do trabalho experimental de Holloway and Tavoularis (1992), cujas principais características estão resumidas na tabela 4.3, nomeadamente, o número de Reynolds baseado na microescala de Taylor (Re_λ) e as três microescalas de Taylor: $\lambda_u = [\overline{u^2}/(\partial u/\partial s)^2]^{1/2}$; $\lambda_v = [2\overline{v^2}/(\partial v/\partial s)^2]^{1/2}$ e $\lambda_w = [2\overline{w^2}/(\partial w/\partial s)^2]^{1/2}$. Escolhemos este escoamento pelo facto de ser o que apresenta maior gradiente de velocidade e constituir o mais exigente teste do ponto de vista numérico.

Na figura 4.5 apresentamos a evolução das tensões de Reynolds ao longo do eixo do canal com curvatura. A escala das abcissas $(\tau - \tau_0)$ foi adimensionalizada usando a velocidade U_c e o gradiente médio dU/dn . $\tau = \frac{x}{U_c} | \frac{dU}{dn} |$ e τ_0 representa o valor de τ no início da curva. Os resultados representados na figura 4.5 foram obtidos numa malha com $185 \times 64 \times 64$ pontos usando a condição de entrada obtida numa simulação prévia. De uma forma geral,

U_c	10.3 [ms ⁻¹]
dU/dn	64 [s ⁻¹]
$Re_\lambda = u'\lambda_u/\nu$	280
$\lambda v/\lambda u$	0.73
$\lambda w/\lambda u$	0.83

Tabela 4.3: Detalhes do escoamento turbulento no interior do canal com curvatura.

podemos dizer que a simulação e os resultados experimentais (em todas as componentes do tensor de Reynolds) mostram os mesmos efeitos da curvatura e do corte na turbulência. No entanto, em termos quantitativos existem diferenças de aproximadamente 23% na tensão de Reynolds uu e 47% em vv .

Para analisar a origem das diferenças registadas entre os resultados numéricos e experimentais, optou-se por não adimensionalizar as tensões de Reynolds usando o seu valor na entrada do canal. Nestas condições, verificamos que nas zonas recta ($\tau - \tau_0 < 0$) e curva ($\tau - \tau_0 > 0$) do canal, os resultados experimentais e numéricos ficam praticamente coincidentes (as curvas que registam a evolução das tensões de Reynolds são proporcionais), com a excepção da tensão de Reynolds uu cujo valor numérico ao longo da secção curva é maior do que o valor experimental, registando nestas condições no final da secção curva ($\tau - \tau_0 = 8$) um acréscimo de aproximadamente 30% face ao valor experimental. Deste modo, fica demonstrada a influência da condição de entrada nos resultados e as diferenças entre os resultados numéricos e experimentais só pode dever-se a mais duas razões: ou (i) o modelo de *submalha* utilizado nas simulações não permite determinar convenientemente as tensões de Reynolds deste escoamento; ou (ii) o degrau utilizado na entrada da curva do trabalho experimental não impede o desenvolvimento da camada limite na secção curva do canal, gerando-se um gradiente longitudinal de pressão, o qual provoca alterações sobre o campo turbulento.

Um estudo recente efectuado por Lopes et al. (2006) veio mostrar a importância do gradiente de pressão nas secções curvas do canal e os seus efeitos na camada limite e na turbulência do escoamento (aceleração ou desaceleração, intermitência). A confirmar-se o pressuposto de que o trabalho experimental está sujeito à influência da camada limite, o gradiente de pressão negativo gerado vai dar origem a uma determinação das tensões de Reynolds por defeito, o que significaria uma maior concordância entre resultados numéricos e experimentais. Contudo, este pressuposto carece de confirmação.

A boa concordância ao longo de todo o canal entre os resultados numéricos e experimentais em termos da evolução da energia cinética da turbulência (figura 4.5d) é um bom indicador de que o modelo de *submalha* utilizado (modelo dinâmico Lagrangeano) faz uma boa previsão para as tensões modeladas, o que nos ajuda a concluir que as diferenças registadas entre as simulações e as medições devem-se sobretudo a duas razões: (i) ao gradiente de pressão longitudinal existente no trabalho experimental devido ao desenvolvimento da camada limite nas paredes da secção curva do canal; (ii) a dificuldades

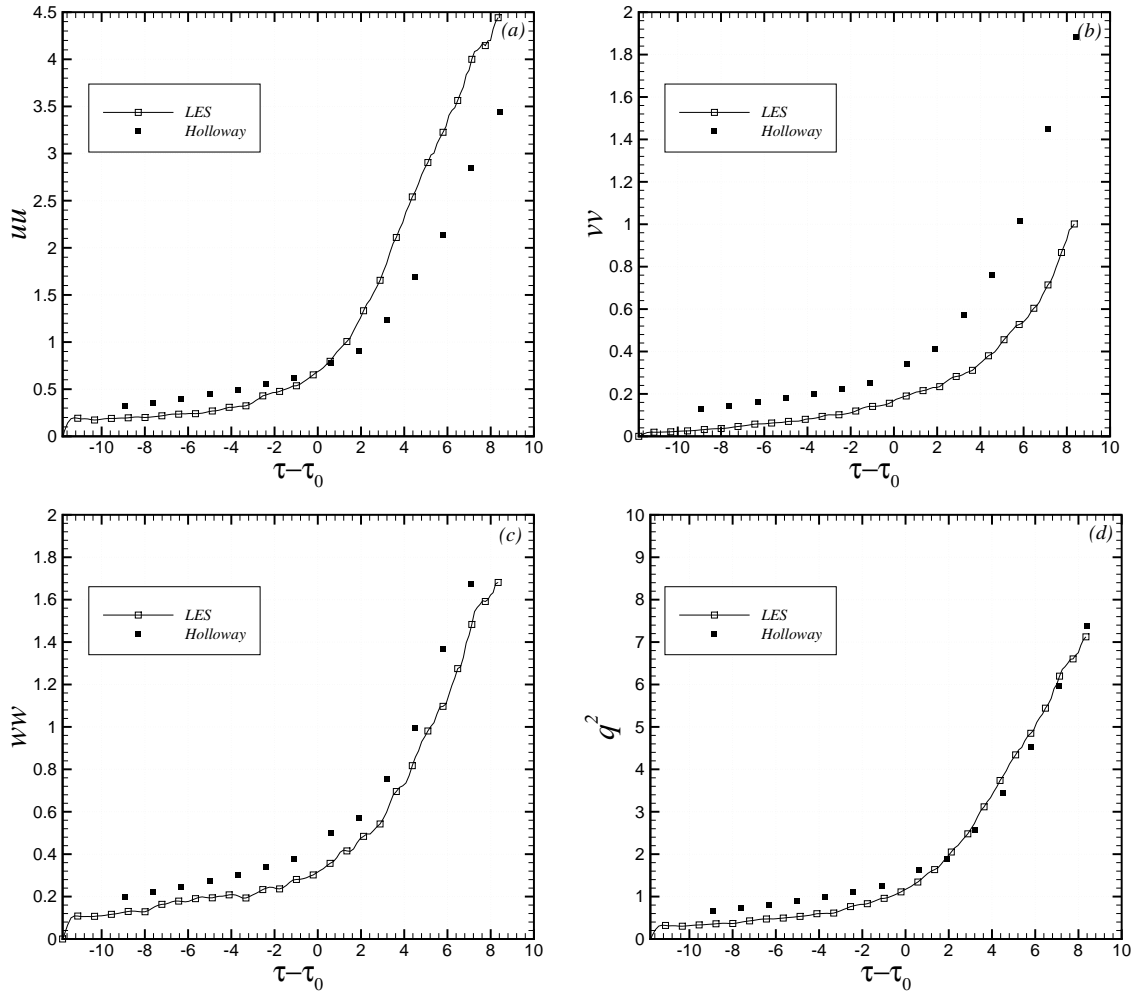


Figura 4.5: Tensões de Reynolds $u_i u_j$ e o dobro da energia cinética, $q^2 = 2k$.

de natureza numérica na geração de um campo turbulento para a entrada com as mesmas características do utilizado no trabalho experimental.

Em qualquer das tensões de Reynolds, podemos distinguir duas leis de variação: a zona recta do canal ($\tau - \tau_0 < 0$) onde o crescimento é algébrico, e a zona curva ($\tau - \tau_0 > 0$) exponencial. Na zona recta, as tensões de Reynolds crescem fruto de uma transferência de energia do campo médio para o campo turbulento por acção do corte; na zona curva, existe ainda o efeito da curvatura que amplifica as tensões de Reynolds a uma taxa superior. Isto acontece, no caso em que $S < 0$, porque as partículas mais próximas do centro de curvatura estão animadas de uma velocidade média maior (e por isso com maior inércia), na presença da curvatura estas partículas tentam resistir à variação de direcção do escoamento e colidem com as partículas de fluido mais afastadas do centro de curvatura, favorecendo o aumento da turbulência e consequentemente o crescimento das tensões de Reynolds.

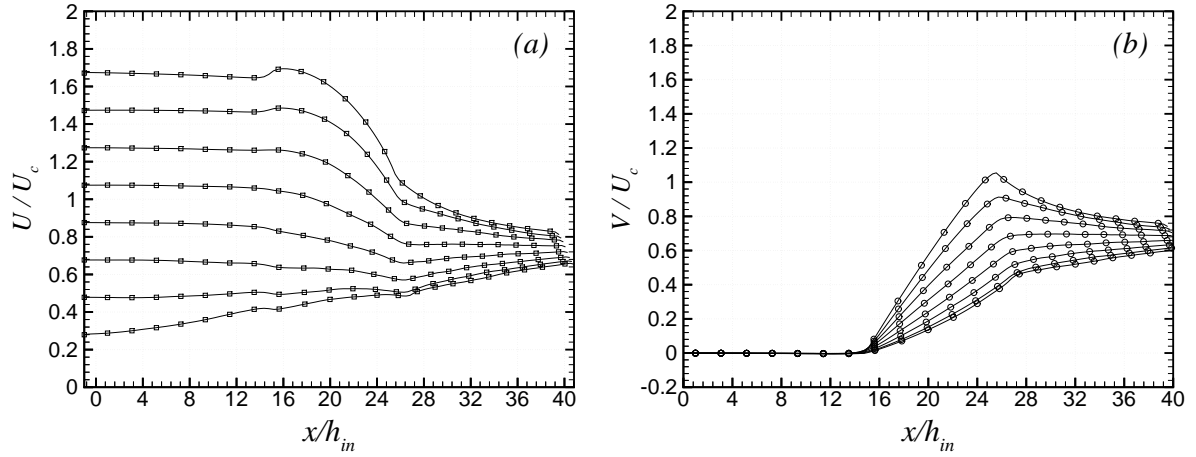


Figura 4.6: Velocidade média axial (a) e vertical (b) ao longo do eixo x do canal: $n/h_{in} = \pm 1$; $n/h_{in} = \pm 1/4$; $n/h_{in} = \pm 1/2$; e $n/h_{in} = \pm 3/4$.

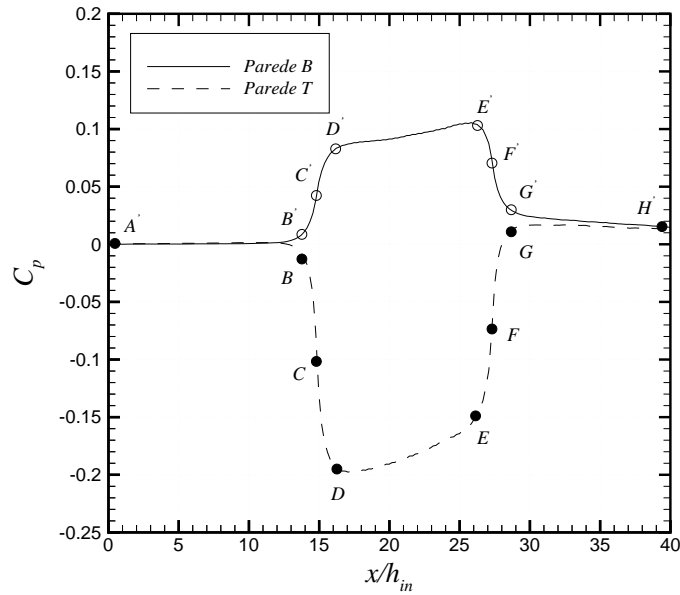


Figura 4.7: Coeficiente de pressão C_p nas paredes superior (Parede T) e inferior (Parede B) do canal.

O campo médio de velocidade representado na figura 4.6 mostra variações longitudinais distintas para a componente U e V da velocidade. Na secção recta do canal o valor da velocidade média U permanece aproximadamente constante até à entrada na curva. Na direcção transversal a velocidade média U aumenta linearmente desde a parede inferior do canal, onde a velocidade é aproximadamente 30% da velocidade U_c no eixo do canal, até atingir na parede superior uma velocidade cerca de 70% superior a U_c . Quando entra na curva, U decresce de forma não-linear, enquanto que a componente V aumenta (para conservar quantidade de movimento) de uma forma linear e atinge o valor máximo no final na curva (V aproximadamente igual a U_c). Na parte recta de saída, as componentes U e V apresentam a mesma tendência com valores praticamente iguais (saída inclinada a 1 radiano).

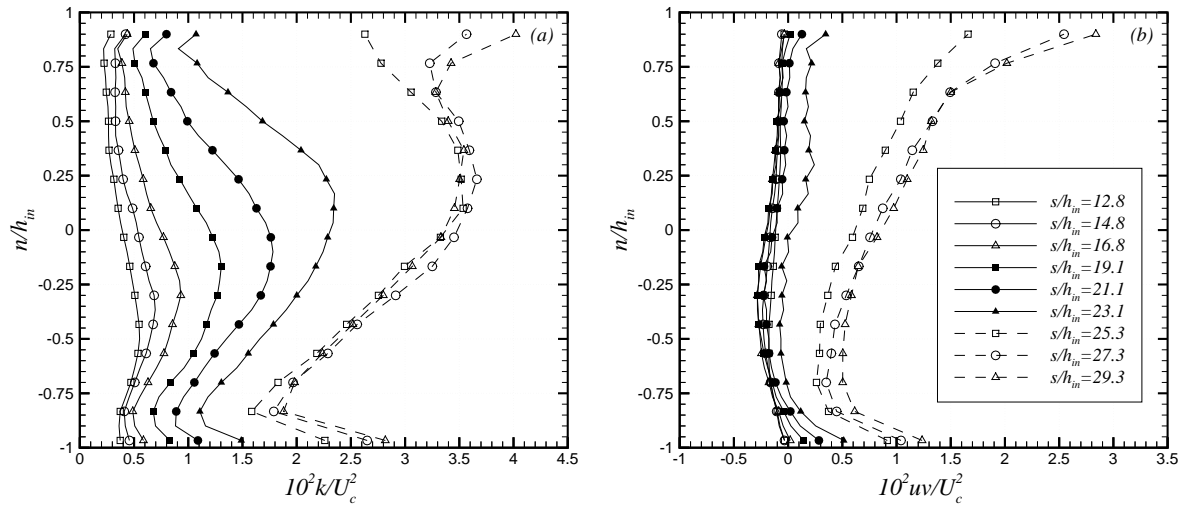


Figura 4.8: Energia cinética da turbulência (a) e tensão de corte (b) em diversas secções: $s/h_{in} = 14,8$ (início da curva); $s/h_{in} = 21,1$ (meio da curva) e $s/h_{in} = 27,3$ (final da curva).

A aceleração centrípeta $a_c = U^2/R$ é significativamente maior na superfície convexa do que na superfície côncava do canal, devido à existência de uma velocidade média maior na parede superior do canal (superfície convexa) do que na parede inferior (superfície côncava), como mostra a figura 4.6: o gradiente vertical da velocidade média tem a direcção e o sentido do centro de curvatura e produz um gradiente médio de pressão com sentido oposto. O crescimento da aceleração centrípeta é conseguido à custa do gradiente de velocidade, porque a diferença do raio de curvatura entre as duas superfícies curvas é muito menor do que as diferenças entre o quadrado da velocidade. Assim, o facto da aceleração centrípeta na superfície convexa do canal (zona curva) ser maior do que na superfície côncava, vai promover o crescimento da turbulência. No caso do gradiente vertical de velocidade inverter o sentido, o efeito vai ser o contrário e a turbulência diminui pela acção do corte.

O valor da pressão na parede (p_w) foi adimensionalizado e representado na figura 4.7

sob a forma de coeficiente de pressão estática na parede $C_p = 2(p_w - p_{ref})/(\rho U_c^2)$ (número de Euler). A pressão de referência utilizada foi a pressão média calculada na direcção vertical y . De imediato, podemos ver que na superfície côncava da curva a pressão média é positiva, enquanto que na superfície convexa, a pressão média é negativa. O coeficiente de pressão C_p é aproximadamente constante e igual a zero na secção recta do canal devido à existência de um gradiente de pressão nulo na direcção do escoamento: na presença de camada limite (como é o caso do trabalho experimental) o C_p não é constante e o escoamento acelera. Na secção curva o valor do C_p cresce de forma mais acentuada no caso da superfície convexa do que no caso da superfície côncava, devido à existência do gradiente de velocidade na direcção e sentido do centro de curvatura. Na secção recta de saída o valor de C_p é aproximadamente constante e diferente de zero, pelo facto desta secção ser inclinada a 1 rad e provocar uma pressão não nula nas paredes.

A variação vertical da energia cinética da turbulência (figura 4.8a) e da tensão de corte (figura 4.8b), em diversos planos perpendiculares à coordenada s distanciados h_{in} para montante e jusante das secções de entrada e saída da curva, respectivamente, mostram também que a intensidade turbulenta aumenta durante a passagem pela curva. A energia cinética da turbulência, aproximadamente simétrica na direcção vertical antes do escoamento entrar na curva, perde simetria aumentando junto à superfície convexa do canal (parede T). A tensão de corte uv que é negativa antes do escoamento entrar na curva, muda de sinal sensivelmente a meio da curva e cresce de forma acentuada, sobretudo à medida que nos aproximamos da superfície convexa do canal.

4.4 Conclusões

O objectivo do trabalho descrito neste capítulo foi através da simulação de um escoamento no interior de um canal com curvatura e gradiente vertical de velocidade, estudar a forma mais adequada de promover a simulação deste tipo de escoamentos, visando a simulação de escoamentos com curvatura e contra-curvatura e conhecer melhor os efeitos do corte e da curvatura na turbulência. Trata-se de um escoamento com corte, do qual dispomos de resultados experimentais que utilizámos na validação numérica com recurso à simulação das grandes escalas da turbulência (LES).

Foi necessário estudar o efeito das médias e da malha na simulação. Definimos como tempo característico 1 s, o qual corresponde ao tempo necessário para que uma variação introduzida em qualquer parâmetro turbulento na entrada seja visível na saída do canal. Verificou-se que para atingir o estado estatisticamente estacionário, foi necessário deixar o escoamento desenvolver durante 6 s para podermos iniciar as médias, as quais devem ser efectuadas durante 6 s. De todas as malhas usadas, verificámos que as direcções mais importantes são a direcção vertical y e transversal z . Neste plano (yz) usar 32×32 nós foi claramente insuficiente, enquanto que os resultados usando 64×64 nós são praticamente coincidentes entre si. De entre as três condições de entrada utilizadas para estabelecer

o campo de flutuações turbulentas, a que melhor aproximou os resultados numéricos dos experimentais foi a baseada no campo turbulento obtido numa simulação prévia de um escoamento com corte, usando como domínio de cálculo um cubo de aresta igual à largura do canal. Esta condição contempla todas as características das outras duas e permite definir alguns parâmetros físicos, como sejam, por exemplo, os momentos estatísticos do campo turbulento obtido.

Os resultados numéricos apresentaram uma boa concordância com os experimentais, mas revelaram diferenças pontuais (inferiores a 30%) pelo facto das condições de entrada (experimental e numérica) serem inevitavelmente diferentes e em nosso entender, o trabalho experimental estar sujeito a efeitos do gradiente longitudinal de pressão, devido ao desenvolvimento da camada limite nas paredes curvas do canal. Contudo, confirmou-se que na zona recta, as tensões de Reynolds crescem fruto de uma transferência de energia do campo médio para o campo turbulento por acção do corte; na zona curva, existe ainda o efeito da curvatura que amplifica as tensões de Reynolds a uma taxa superior. No caso do corte ser negativo ($S < 0$), as partículas mais próximas do centro de curvatura estão animadas de uma velocidade média maior, (e por isso com maior inércia) e ao colidirem com as partículas de fluido mais afastadas do centro de curvatura vão promover o aumento da turbulência, favorecendo o crescimento das tensões de Reynolds.

Capítulo 5

Simulação de um Escoamento Turbulento com Corte e Gradiente Vertical Escalar num Canal com Dupla Curvatura

Resumo do Capítulo

Simulámos os escoamentos turbulentos no interior de um canal com dupla curvatura e estudámos os efeitos da mudança de curvatura e da intensidade do corte e da curvatura na turbulência e no transporte de escalares passivos, com recurso à simulação das grandes escalas da turbulência (LES—*Large Eddy Simulation*). Tratam-se de escoamentos sem desenvolvimento de camada limite, com número de Reynolds baseado na semialtura do canal (Re_b) igual a 68000 e número de Prandtl $Pr = 1$, com corte e gradiente linear escalar na direcção vertical. Considerámos 18 intensidades de corte ($S \in [-0.1560; 0.044]$) e do gradiente escalar ($s_\phi \in [-1.557; 0.445]$) e vários canais com raios de curvatura R_c iguais a 1, 2 e 3.5 metros. Os campos de velocidade e escalar utilizados na entrada, foram obtidos a partir da simulação prévia de um escoamento com corte e gradiente médio escalar, usando como domínio de cálculo um cubo de aresta igual à largura do canal em S. Nas fronteiras inferior e superior do canal utilizou-se fluxo escalar nulo e condição de escorregamento livre. A condição convectiva na saída do canal foi discretizada com recurso ao método de Euler explícito para a velocidade e para o campo escalar. Mostrámos que o corte, a curvatura e a contra-curvatura provocam alterações nas tensões de Reynolds e na sua anisotropia; na anisotropia das tensões principais; nos fluxos e na variância escalares, promovendo o seu crescimento quando o corte e a curvatura têm sinais contrários (corte negativo) e diminuindo o seu crescimento quando o corte e a

curvatura têm o mesmo sinal (corte positivo). Após a passagem pelas secções curvas os escoamentos apresentam maior energia cinética turbulenta (logo com maior capacidade de transporte e de mistura turbulenta) e anisotropia, sobretudo os escoamentos com maior curvatura ($R_c = 2$ m e $R_c = 1$ m) ou com maior intensidade de corte. A direcção principal máxima também mudou de orientação, comparativamente com a direcção principal do escoamento antes das secções curvas.

5.1 Introdução

Os escoamentos turbulentos com corte são frequentes em aplicações de engenharia. Surgem muitas vezes associados a curvatura e contra-curvatura das linhas de corrente e podem envolver o transporte de quantidades escalares, como por exemplo, um elemento químico ou a temperatura. Tem sido feito um grande esforço para perceber os efeitos que o corte e a curvatura têm na turbulência (So and Mellor, 1975; Meroney and Bradshaw, 1975; Muck et al., 1985). No entanto, estes trabalhos de natureza experimental revelam alguma fragilidade em tratar este problema, nomeadamente devido às perturbações provocadas pelas paredes do canal no escoamento. Por outro lado, a construção de instalações para medição destes escoamentos é morosa e envolve custos avultados, pelo que a simulação se torna mais viável.

O objectivo do trabalho descrito neste capítulo foi o estudo dos efeitos da mudança de curvatura e da intensidade do corte e da curvatura na turbulência e no transporte de escalares passivos, efectuando a simulação de escoamentos turbulentos com corte e gradiente escalar na direcção vertical, usando a simulação das grandes escalas da turbulência (LES). Optámos pela simulação de um escoamento sem camada limite, com corte e dupla curvatura identificado pelo grupo AGARD (1998) por HOM28, do qual são conhecidos resultados experimentais detalhados de Chebbi et al. (1998). A simulação deste escoamento fica justificada pelas dificuldades apontadas por Holloway and Tavoularis (1992) em anular a existência da camada limite nas paredes do canal, o que impede o estudo dos efeitos do corte e da curvatura num escoamento de corte *puro*.

Numa primeira fase deste trabalho, simulámos os escoamentos que apresentavam maior intensidade do corte, $dU/dn = \pm 89.48 \text{ s}^{-1}$. Assim, testaram-se os métodos numéricos utilizados em situações exigentes, por comparação com os resultados de Chebbi et al. (1998). Posteriormente, alargou-se o estudo para observar o efeito da intensidade do corte e da curvatura na turbulência e no transporte de escalares passivos. Recorremos à evolução de diversos parâmetros, como por exemplo: as tensões de Reynolds, o seu tensor anisotrópico e a anisotropia das tensões principais. Os resultados das simulações LES confirmam de uma forma geral os resultados experimentais, registando evoluções de energia cinética coincidentes. Contudo, foram observadas diferenças inferiores a 30% nas tensões de Reynolds, as quais atribuímos à condição de entrada usada nas simulações e à influência da camada

limite presente no trabalho experimental.

Este capítulo foi organizado em 4 secções, incluindo esta, de introdução, e a última onde apresentamos as conclusões principais. A secção 5.2 diz respeito ao modelo matemático e às técnicas numéricas utilizadas. Na secção 5.3 é feita a análise dos resultados e é constituída por 3 subsecções que incidem sobre: os efeitos da curvatura e contra-curvatura na turbulência, por comparação com os resultados experimentais; os efeitos da intensidade da curvatura e os efeitos da intensidade do corte e do gradiente escalar na turbulência.

5.2 Modelo Matemático e Técnicas Numéricas

O modelo matemático foi constituído pela equação da continuidade (2.9), equações de Navier-Stokes (2.10) e equação de transporte escalar (2.11), as quais foram discretizadas usando as técnicas numéricas referidas na secção 2.3 e resolvidas usando a metodologia da simulação das grandes escalas da turbulência (LES), modelando as tensões de *submalha* utilizando o modelo Dinâmico, descrito na secção 2.2.2.

A presente secção é composta por 3 subsecções: na subsecção 5.2.1 descrevemos os pormenores relacionados com o domínio de cálculo e as condições de fronteira do escoamento; na subsecção 5.2.2 apresentamos a forma como foi estabelecida a condição de entrada, usando uma simulação prévia e na subsecção 5.2.3 estabelecemos as condições em que foram realizadas as simulações.

5.2.1 Domínio de Cálculo e Condições de Fronteira

A geometria utilizada neste estudo foi um canal com curvatura e contra-curvatura, também designado por canal em S ou por canal com dupla curvatura (figura 5.1). Com o objectivo de estudar o efeito da intensidade da curvatura na turbulência, foram considerados três canais que diferem entre si no raio de curvatura das secções curvas: $R_{c1} = 1$ m; $R_{c2} = 2$ m e $R_{c3} = 3.5$ m. A geometria considerada como referência foi igual à utilizada no trabalho experimental de Chebbi et al. (1998) e representava a situação de menor curvatura com $R_c = 3.5$ m. As malhas usadas foram regularmente espaçadas na direcção vertical y e transversal z com uma expansão de 5% na secção de saída de comprimento $(4 + 1/4)h_{in}$ ($h_{in} = 120$ mm representa a semialtura do canal). A secção de entrada de comprimento h_{in} tinha como função permitir o desenvolvimento da condição de entrada e a sua aproximação com a condição experimental.

Nas fronteiras inferior e superior do canal utilizou-se condição de escorregamento livre e fluxo escalar nulo. Na saída usámos condição convectiva para a velocidade e para o campo escalar, discretizada com recurso ao método de Euler explícito. Para a pressão considerámos extrapolação linear em todas as fronteiras.

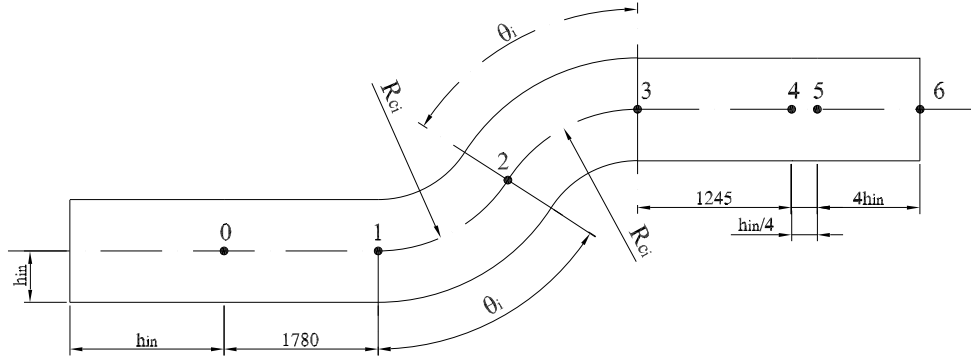


Figura 5.1: Geometria do canal em S, com secção de entrada, curva e contracurva e secção de saída. A semialtura do canal foi $h_{in} = 120$ mm, $\theta_1 = 60^\circ$, $\theta_2 = 30^\circ$ e $\theta_3 = 17^\circ$ para os raios de curvatura $R_{c1} = 1$ m, $R_{c2} = 2$ m e $R_{c3} = 3.5$ m, respectivamente. As restantes dimensões estão em milímetros.

$\overline{u^2}$	$\overline{v^2}$	$\overline{w^2}$	\overline{uv}	$\overline{u\phi}$	$\overline{v\phi}$	$\overline{w\phi}$	$\overline{\phi^2}$
0.345	0.121	0.211	0.195	0.5	0.5	0.5	0.55

Tabela 5.1: Correlações prescritas para os campos iniciais da simulação que gerou a condição de entrada.

5.2.2 Geração da Condição de Entrada

Os campos de velocidade e escalar utilizados na entrada foram obtidos numa simulação prévia de um escoamento com corte e gradiente vertical do campo escalar, usando como domínio de cálculo um cubo de aresta π cm igual à largura do canal. Esta simulação foi realizada utilizando a simulação numérica directa (DNS—*Direct Numerical Simulation*), com condição de corte periódico na direcção do corte e do gradiente vertical do campo escalar e condições periódicas nas restantes direcções. Os campos iniciais usados na simulação prévia foram aleatórios com distribuições Gaussianas e as correlações são indicadas na tabela 5.1.

O tempo de integração das equações foi de 0.2 s, que corresponde a um tempo de vida característico de um turbilhão e que coincide também com o instante em que é atingido o estado estatisticamente estacionário do escoamento. As correlações indicadas na tabela 5.1 foram ajustadas por tentativas de modo a que no instante $t = 0.2$ s os campos apresentassem correlações idênticas aos campos dos resultados experimentais medidos na entrada do canal em S. As estatísticas dos campos de velocidade que foram usados na entrada do canal em S (tabela 5.3) são iguais às medidas no trabalho experimental, com excepção da tensão de corte \overline{uv} , (tabela 5.2), o que permite concluir que a metodologia usada na geração da condição de entrada foi adequada.

$\overline{u^2}$	$\overline{v^2}$	$\overline{w^2}$	\overline{uv}
0.321	0.130	0.197	0.093

Tabela 5.2: Estatísticas do campo de velocidade medidas por Chebbi et al. (1998) na entrada do canal em S.

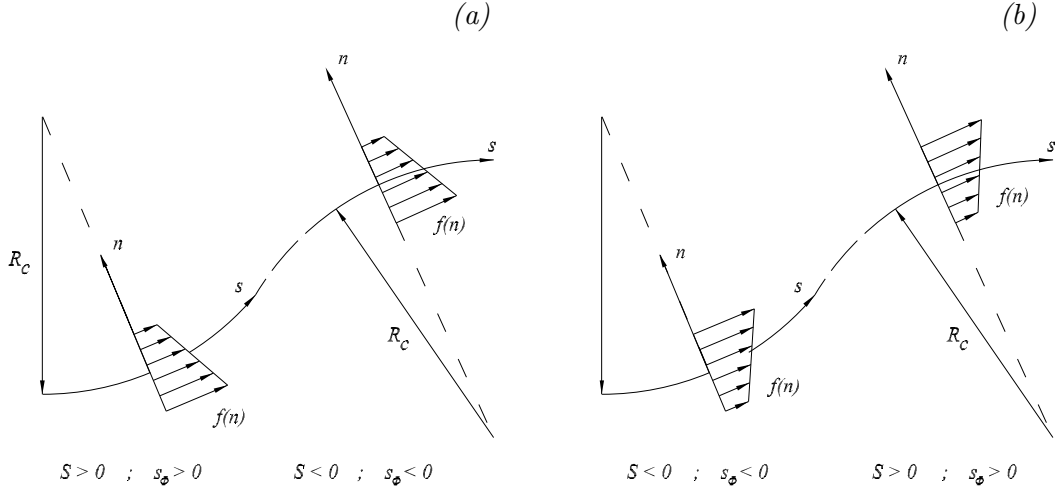


Figura 5.2: Perfil médio da velocidade e gradiente vertical escalar (a) corte e gradiente escalar positivo ($S > 0$ e $s_\phi > 0$) e (b) corte e gradiente escalar negativo ($S < 0$ e $s_\phi < 0$). $f(n)$ representa a componente U da velocidade e o campo escalar ϕ . S e s_ϕ representam os gradientes de velocidade e escalar, respectivamente.

5.2.3 Condições de Teste das Simulações

A importância relativa da curvatura, velocidade média e do corte na turbulência é contabilizada pelo parâmetro adimensional,

$$S = (U_c/R_c)/(dU/dn) . \quad (5.1)$$

Do mesmo modo, o papel da curvatura do campo médio escalar e do gradiente vertical do campo escalar é quantificado pelo parâmetro também adimensional,

$$s_\phi = (\phi_c/R_c)/(d\phi/dn) . \quad (5.2)$$

As variáveis $U_c = 10.3$ m/s e $\phi_c = 1.03$ representam a velocidade e o campo escalar no centro do canal, dU/dn é o gradiente médio da velocidade (corte), $d\phi/dn$ o gradiente médio do campo escalar e R_c o raio de curvatura do canal. Os parâmetros S e s_ϕ podem ser positivos ou negativos, dependendo da orientação do corte médio e do gradiente vertical do campo escalar relativamente à curvatura. $S \rightarrow \pm\infty$ representa um escoamento com curvatura e sem corte; $S = 0$ escoamento com corte e sem curvatura; $S = 1$ rotação de corpo rígido; e $S = -1$ escoamento irrotacional (vorticidade nula). Todas as simulações

$\overline{u^2}$	$\overline{v^2}$	$\overline{w^2}$	\overline{uv}	$\overline{u\phi}$	$\overline{v\phi}$	$\overline{w\phi}$	$\overline{\phi^2}$
0.321	0.130	0.197	0.088	0.261	0.108	0.179	1.490
S_u	S_v	S_w	S_ϕ	F_u	F_v	F_w	F_ϕ
0.07	0.09	-0.02	0.11	3.11	2.97	3.12	3.11
$S_{\partial u/\partial x}$	$S_{\partial u/\partial y}$	$S_{\partial u/\partial z}$		$F_{\partial u/\partial x}$	$F_{\partial u/\partial y}$	$F_{\partial u/\partial z}$	
-0.43	0.11	-0.02		3.36	3.20	3.14	
$S_{\partial v/\partial x}$	$S_{\partial v/\partial y}$	$S_{\partial v/\partial z}$		$F_{\partial v/\partial x}$	$F_{\partial v/\partial y}$	$F_{\partial v/\partial z}$	
-0.09	-0.01	-0.02		3.14	3.00	3.15	
$S_{\partial w/\partial x}$	$S_{\partial w/\partial y}$	$S_{\partial w/\partial z}$		$F_{\partial w/\partial x}$	$F_{\partial w/\partial y}$	$F_{\partial w/\partial z}$	
-0.04	-0.02	-0.23		3.04	3.38	3.39	
$S_{\partial \phi/\partial x}$	$S_{\partial \phi/\partial y}$	$S_{\partial \phi/\partial z}$		$F_{\partial \phi/\partial x}$	$F_{\partial \phi/\partial y}$	$F_{\partial \phi/\partial z}$	
-0.31	-0.16	-0.22		3.43	3.46	3.40	
$\overline{w_x^2}$	$\overline{w_y^2}$	$\overline{w_z^2}$		$\overline{w_x^2}/\sum \overline{w_i^2}$	$\overline{w_y^2}/\sum \overline{w_i^2}$	$\overline{w_z^2}/\sum \overline{w_i^2}$	
12.65	22.84	19.65		0.229	0.414	0.356	

Tabela 5.3: Estatísticas dos campos usados na entrada do canal em S calculadas usando 0.2 s de tempo de integração. O operador ($\overline{}$) representa o valor médio no volume, S é a *skewness* (coeficiente de assimetria), F é a *flatness* (coeficiente de achatamento)

foram realizadas usando um número de Reynolds baseado na semialtura do canal ($Re_b = 2U_{ch_{in}}/\nu$) igual a 68000 e número de Prandtl $Pr = 1$.

Nas tabelas 5.4 a 5.6 apresentamos as condições de teste em que foram realizadas as simulações. Cada simulação é identificada pela referência NE (corte e gradiente vertical do campo escalar negativos $S < 0$ e $s_\phi < 0$ na entrada da primeira curva) ou PE (corte e gradiente vertical do campo escalar positivos $S > 0$ e $s_\phi > 0$ na entrada da primeira curva) como identificamos na figura 5.2. A esta referência acresce uma letra A, B ou C que identifica a intensidade do corte e do gradiente vertical do campo escalar. Por último a referência que identifica o raio de curvatura das secções curvas: R1 ($R_c = 1$ m), R2 ($R_c = 2$ m) ou R35 ($R_c = 3.5$ m).

5.3 Análise dos Resultados

Os resultados aqui apresentados estão organizados em duas secções. A secção 5.3.1 tem por objectivo a validação das condições de teste utilizadas (e.g., condição de entrada e refinamento da malha), comparando os resultados numéricos com os resultados experimentais. Nas secções 5.3.2 e 5.3.3 apresentamos os resultados das simulações que diferem entre si na intensidade do corte, do gradiente vertical do campo escalar e da curvatura, cujo objectivo foi o estudo dos efeitos destes três parâmetros na turbulência.

Malha: $250 \times 64 \times 64$ $\Delta t = 10^{-3}s$ $Re_b = 68000$					
Simulação	dU/dn [s^{-1}]	$d\phi/dn$ [ϕ m^{-1}]	S	s_ϕ	q_{ref} [m^2s^{-2}]
NEAR1	66.17	6.62	0.156	1.557	0.880
NEBR1	77.83	7.78	0.132	1.323	1.176
NECR1	89.48	8.95	0.115	1.151	1.583
PEAR1	-66.17	-6.62	-0.156	-1.557	1.105
PEBR1	-77.83	-7.78	-0.132	-1.323	1.827
PECR1	-89.48	-8.95	-0.115	-1.151	2.792
P IV 3.2Ghz (Dell Precision 360) 2Gb RAM					

Tabela 5.4: Condições de teste usadas nas simulações LES no canal com $R_c = 1$ m incluindo os parâmetros adimensionais que contabilizam o efeito da curvatura, do corte médio e do gradiente vertical escalar. Os valores de $U_c = 10.3$ m/s e $\phi_c = 1.03$ foram iguais em todas as simulações.

Para auxiliar a análise dos resultados, recorreremos às equações de transporte das quantidades que calculamos com base nos resultados das simulações. Assim, as equações de transporte da energia cinética turbulenta por unidade de massa, $\frac{1}{2}q^2 = \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2)$, das tensões de Reynolds turbulentas são as seguintes:

$$\bar{U} \frac{d(\frac{1}{2}q^2)}{ds} = P - \epsilon, \quad (5.3)$$

$$\bar{U} \frac{d(\frac{1}{2}\overline{u^2})}{ds} = -\overline{uv} \frac{\partial \bar{U}}{\partial n} (1 + S) + \phi_{uu} - \epsilon_{uu}, \quad (5.4)$$

$$\bar{U} \frac{d(\frac{1}{2}\overline{v^2})}{ds} = 2\overline{vw} \frac{\partial \bar{U}}{\partial n} S + \phi_{vv} - \epsilon_{vv}, \quad (5.5)$$

$$\bar{U} \frac{d(\frac{1}{2}\overline{w^2})}{ds} = \phi_{ww} - \epsilon_{ww}, \quad (5.6)$$

$$\bar{U} \frac{d(\frac{1}{2}\overline{uv})}{ds} = -\overline{v^2} \frac{\partial \bar{U}}{\partial n} (1 + S) + 2\overline{u^2} \frac{\partial \bar{U}}{\partial n} S + \phi_{uv} - \epsilon_{uv}, \quad (5.7)$$

onde P representa a produção de energia cinética turbulenta,

$$P = -\overline{uv} \frac{\partial \bar{U}}{\partial n} (1 - S), \quad (5.8)$$

ϵ a sua taxa de dissipação e ϵ_{uu} , ϵ_{vv} , ϵ_{ww} e ϵ_{uv} as taxas de dissipação de uu , vv , ww e uv , respectivamente. ϕ_{uu} , ϕ_{vv} , ϕ_{ww} e ϕ_{uv} são as covariâncias da pressão-taxas de deformação.

A anisotropia das tensões de Reynolds foi estudada com recurso ao tensor anisotrópico:

$$m_{ij} = \begin{cases} \overline{u_i u_j} / \overline{q^2} - 1/3, & i=j; \\ \overline{u_i u_j} / \overline{q^2}, & i \neq j, \end{cases} \quad (5.9)$$

Malha: $250 \times 64 \times 64$ $\Delta t = 10^{-3}s$ $Re_b = 68000$					
Simulação	dU/dn [s^{-1}]	$d\phi/dn$ [$\phi \text{ m}^{-1}$]	S	s_ϕ	q_{ref} [m^2s^{-2}]
NEAR2	66.17	6.62	0.078	0.778	0.910
NEBR2	77.83	7.78	0.066	0.662	0.900
NECR2	89.48	8.95	0.058	0.576	2.090
PEAR2	-66.17	-6.62	-0.078	-0.778	1.110
PEBR2	-77.83	-7.78	-0.066	-0.662	1.875
PECR2	-89.48	-8.95	-0.058	-0.576	2.866
P IV 3.2Ghz (Dell Precision 360) 2Gb RAM					

Tabela 5.5: Condições de teste usadas nas simulações LES no canal com $R_c = 2$ m incluindo os parâmetros adimensionais que contabilizam o efeito da curvatura, do corte médio e do gradiente vertical escalar. Os valores de $U_c = 10.3$ m/s e $\phi_c = 1.03$ foram iguais em todas as simulações.

onde $\overline{q^2} = (\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2})$ representa o dobro da energia cinética da turbulência por unidade de massa.

A anisotropia das tensões de Reynolds depende da orientação dos eixos coordenados, os quais neste caso variam de orientação (Chebbi et al., 1998). Para observar de forma mais clara o efeito da curvatura na turbulência temos de observar a evolução de parâmetros que permaneçam invariantes com a rotação do sistema de coordenadas. Um destes parâmetros é por exemplo a anisotropia das tensões principais, cujas componentes para a situação bi-dimensional são determinadas por:

$$m_{1,2} = \frac{m_{uu} + m_{vv}}{2} \pm \left[\left(\frac{m_{uu} - m_{vv}}{2} \right)^2 + m_{uv}^2 \right] \quad \text{e} \quad m_3 = m_{uv} . \quad (5.10)$$

Outro invariante dependente da anisotropia das tensões principais é a anisotropia escalar,

$$m^2 = m_{uu}^2 + m_{vv}^2 + m_{ww}^2 + 2m_{uv}^2 . \quad (5.11)$$

As direcções principais $\alpha_{1,2,3}$ (em radianos) ficam definidas pelo ângulo α_1 entre a tensão principal máxima e o eixo- s :

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{-2m_{uv}}{m_{uu} - m_{vv}} , \quad \alpha_2 = \alpha_1 + \frac{\pi}{2} \quad \text{e} \quad \alpha_3 \equiv z . \quad (5.12)$$

5.3.1 Efeitos da Curvatura e Contra-Curvatura na Turbulência

A evolução das tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ ao longo da linha de eixo do canal (figuras 5.3a a 5.3d e figuras 5.4a a 5.4d) mostra que os resultados experimentais e as simulações LES

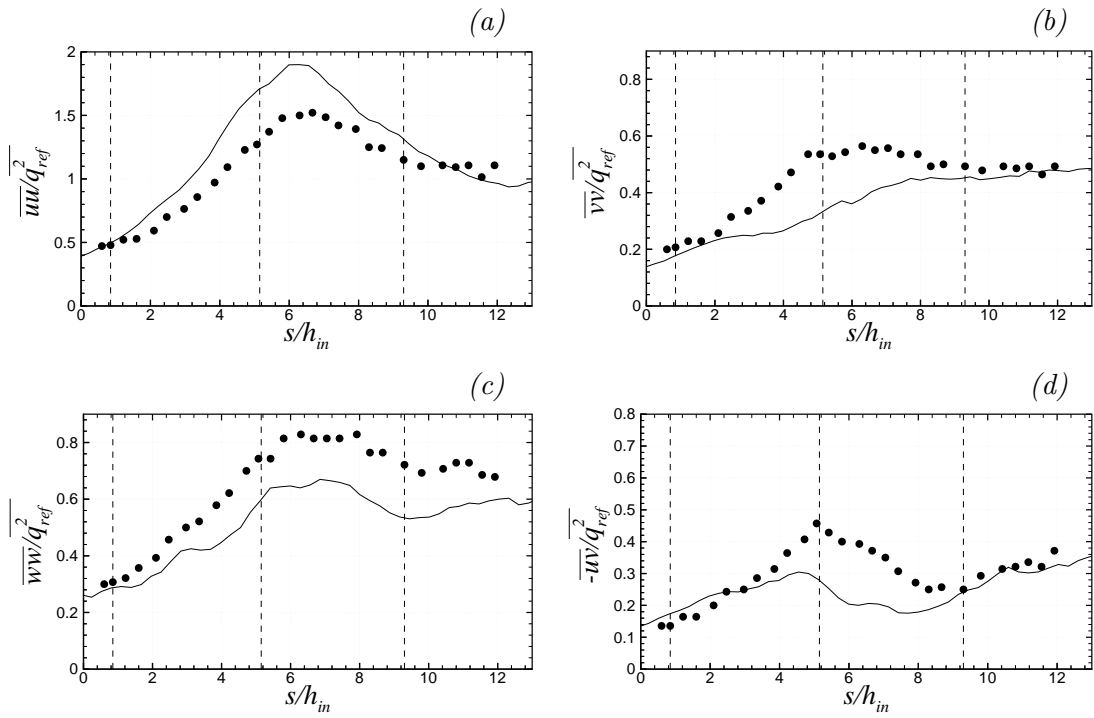


Figura 5.3: Evolução das tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ ao longo da linha de eixo do canal de raio $Rc = 3.5$ m para a situação de corte negativo à entrada. A energia cinética da turbulência de referência, \overline{q}_{ref}^2 (na secção de entrada da primeira curva) foi $1.4 \text{ m}^2 \text{s}^{-2}$ no trabalho experimental (\bullet) e $1.2 \text{ m}^2 \text{s}^{-2}$ na simulação LES (—). As linhas verticais indicam o local onde existe a mudança de curvatura.

Malha: $250 \times 64 \times 64$ $\Delta t = 10^{-3}s$ $Re_b = 68000$					
Simulação	dU/dn [s^{-1}]	$d\phi/dn$ [ϕ m^{-1}]	S	s_ϕ	q_{ref} [m^2s^{-2}]
NEAR35	66.17	6.62	0.044	0.445	0.900
NEBR35	77.83	7.78	0.038	0.378	1.408
NECR35	89.48	8.95	0.033	0.329	2.139
PEAR35	-66.17	-6.62	-0.044	-0.445	1.256
PEBR35	-77.83	-7.78	-0.038	-0.378	1.883
PECR35	-89.48	-8.95	-0.033	-0.329	2.053
P IV 3.2Ghz (Dell Precision 360) 2Gb RAM					

Tabela 5.6: Condições de teste usadas nas simulações LES no canal com $R_c = 3.5$ m incluindo os parâmetros adimensionais que contabilizam o efeito da curvatura, do corte médio e do gradiente vertical escalar. Os valores de $U_c = 10.3$ m/s e $\phi_c = 1.03$ foram iguais em todas as simulações.

apresentam andamentos idênticos. Quando o corte é positivo (primeira curva na configuração da figura 5.2a e segunda curva na configuração da figura 5.2b), a curvatura desempenha um papel *estabilizador* diminuindo o crescimento da turbulência, quando o corte é negativo (segunda curva na configuração da figura 5.2a e primeira curva na configuração da figura 5.2b), a curvatura desempenha um papel *desestabilizador*, promovendo o crescimento da turbulência.

A figura 5.5 mostra andamentos da energia cinética das flutuações turbulentas praticamente coincidentes entre os resultados numéricos e os experimentais. Quando o corte é negativo (figura 5.5a) a energia cinética cresce de forma exponencial desde o início da primeira curva até h_{in} após a entrada na segunda curva. As constantes que definem a variação exponencial da energia cinética podem ser encontradas no trabalho de Holloway and Tavoularis (1992) para algumas intensidades de corte. Ao comprimento h_{in} corresponde um tempo de resposta do escoamento à mudança de curvatura. Desde este ponto até à saída da segunda curva que a energia cinética decresce, registrando uma taxa de decréscimo que corresponde a aproximadamente 50% da taxa de crescimento durante a primeira curva. Na segunda curva a orientação do gradiente vertical de velocidade face à curvatura não favorece o aumento da turbulência. A equação (5.3) mostra que a variação da energia cinética é caracterizadas por dois termos: produção (P) e dissipação (ϵ). Na primeira curva, quando o corte é positivo (figura 5.5b) a produção e dissipação de energia cinética equilibram-se, resultando um valor praticamente constante de energia cinética. Com a mudança de curvatura, o gradiente vertical de velocidade e a curvatura orientam-se no sentido de favorecer o aumento da energia cinética (o termo de produção prevalece face ao termo dissipativo).

As maiores diferenças registadas entre os resultados numéricos e experimentais foram de aproximadamente 30% e podem dever-se às seguintes razões: (i) o modelo de *submalha* (modelo dinâmico) utilizado nas simulações não permite determinar convenientemente as

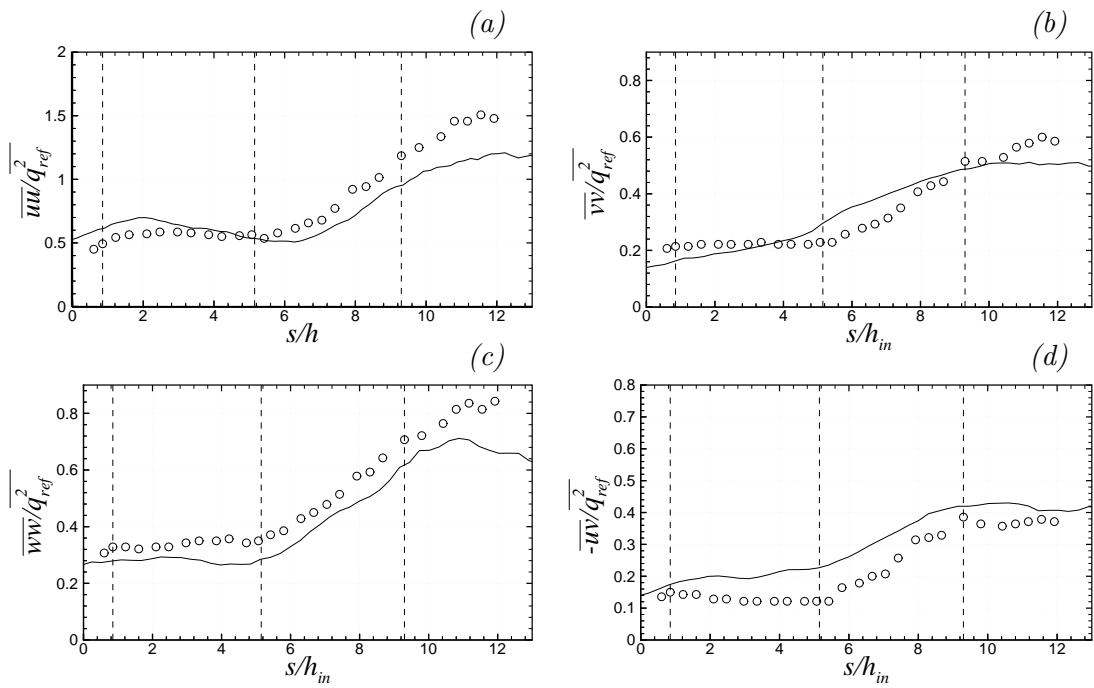


Figura 5.4: Evolução das tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ ao longo da linha de eixo do canal de raio $Rc = 3.5$ m para a situação de corte positivo à entrada. A energia cinética da turbulência de referência, \overline{q}_{ref}^2 (na secção de entrada da primeira curva) foi $1.46 \text{ m}^2 \text{s}^{-2}$ no trabalho experimental (o) e $1.55 \text{ m}^2 \text{s}^{-2}$ na simulação LES (—). As linhas verticais indicam o local onde existe a mudança de curvatura.

tensões de Reynolds destes escoamentos, ainda que este modelo seja considerado o que melhor reproduz a transferência inversa de energia (e.g., Piomelli et al., 1991); (ii) a condição de entrada usada nas simulações difere inevitavelmente da condição experimental (ver secção 4.3.3). O tempo de resposta das diversas tensões de Reynolds é distinto, tal como ocorre no trabalho de Keating et al. (2004), o que torna complexo conseguir obter numa dada secção tensões de Reynolds apropriadas; (iii) no trabalho experimental não foi possível gerar um campo turbulento com corte e velocidade no eixo do canal constante; (iv) o degrau utilizado no trabalho experimental na entrada da primeira secção curva (introduzido com o objectivo de eliminar a camada limite) provoca desenvolvimento de vórtices e alterações sobre o campo turbulento. Mesmo que com a utilização do degrau fosse possível eliminar a camada limite, não seria anulado o seu desenvolvimento nas secções curvas, gerando-se desta forma um gradiente longitudinal de pressão, ainda que os autores tenham tentado diminuir o seu efeito fazendo um aumento gradual da secção transversal para jusante. (v) os sensores utilizados nas medições também perturbam de alguma forma o desenvolvimento do escoamento, sendo que a sua incerteza foi estimada em $\pm 8\%$ na medição da tensão de corte.

A equação (5.8) ajuda a compreender o mecanismo de produção de energia cinética ao longo do canal considerando as duas configurações de corte positivo e negativo. Admitindo que o raio de curvatura é positivo quando tiver o mesmo sentido do gradiente vertical de velocidade e negativo na situação inversa. Se o gradiente vertical de velocidade for orientado como indica a figura 5.2a (gradiente vertical de velocidade positivo) e atendendo à equação (5.1) podemos ver que o valor de S é negativo na primeira curva e positivo na segunda curva. Quando o gradiente vertical de velocidade é negativo (figura 5.2b) S é positivo na primeira curva e negativo na segunda.

As figuras 5.3d e 5.4d mostram valores da tensão de corte ao longo do canal sempre negativos independentemente do corte ser positivo ou negativo. Assim, podemos concluir que a produção de energia cinética é sempre positiva independentemente do sinal do gradiente vertical de velocidade. Quando S é negativo (segunda curva na configuração da figura 5.2a e primeira curva na configuração da figura 5.2b) a produção de energia cinética é maior do que quando S é positivo (primeira curva na configuração da figura 5.2a e segunda curva na configuração da figura 5.2b).

Apesar da energia cinética turbulenta do trabalho experimental e numérico ser igual apresentam produção e dissipação diferentes. A equação (5.8) indica que a produção de energia cinética tem o mesmo andamento da tensão de corte, à qual devemos aplicar o factor de escala $\partial \bar{U} / \partial n (1 - S)$. Assim, a figura 5.3d mostra que a produção de energia cinética do LES é geralmente menor do que a dos valores medidos no trabalho experimental na configuração da figura 5.2b. No caso da configuração da figura 5.2a a produção de energia cinética prevista pelo LES é maior do que nas medições (ver a figura 5.4d). Deste modo, a dissipação estimada pelo LES é menor do que a dissipação medida no caso da configuração da figura 5.2b e maior no caso da configuração da figura 5.2a.

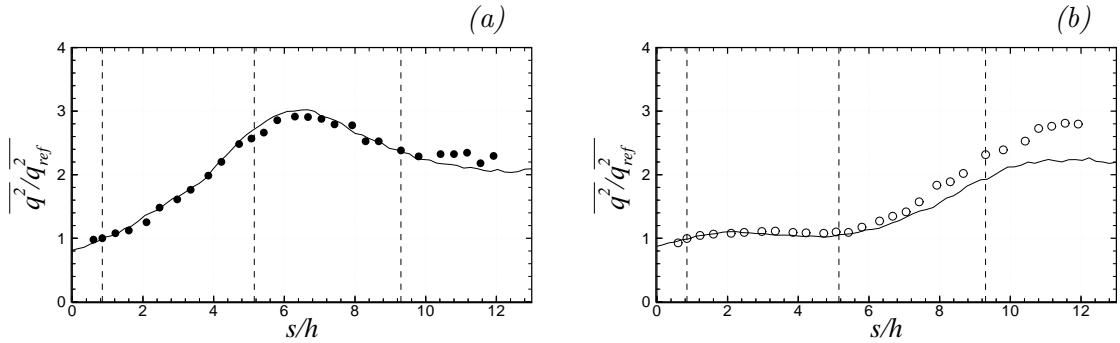


Figura 5.5: Evolução da energia cinética da turbulência $\overline{q^2}$ ao longo do eixo do canal com $R_c = 3.5$ m para (a) corte negativo à entrada e (b) corte positivo à entrada. Os símbolos (\bullet) e (\circ) representam os resultados experimentais e as linhas (—) representam os resultados de LES. As linhas verticais indicam o local onde existe a mudança de curvatura.

5.3.2 Efeitos da Intensidade da Curvatura na Turbulência

Para compreender os efeitos que a intensidade da curvatura tem sobre as estruturas turbulentas, efectuámos simulações que diferem entre si no raio de curvatura. Consideraram-se três situações com raios de curvatura R_c iguais a 1 m, 2 m e 3.5 m, respectivamente. A configuração com $R_c = 3.5$ m corresponde à geometria do trabalho experimental de Chebbi et al. (1998) e representa a situação de menor curvatura $k = 1/R_c$.

As figuras 5.6a e 5.6c mostram que o efeito da intensidade da curvatura nas tensões normais \overline{uu} e \overline{ww} é semelhante. Quando o corte é negativo (primeira curva na configuração da figura 5.2b e segunda curva na configuração da figura 5.2a) as tensões de Reynolds \overline{uu} e \overline{ww} aumentam devido ao aumento da curvatura k , e diminuem quando o corte é positivo (segunda curva na configuração da figura 5.2b e primeira curva na configuração da figura 5.2a). Contudo, a taxa de crescimento de \overline{uu} é maior que a taxa de crescimento de \overline{ww} (não existe produção de \overline{ww} como mostra a equação (5.6) mas existe redistribuição vinda da componente \overline{uu}). O efeito da intensidade de curvatura k na tensão normal \overline{vv} e na tensão de corte \overline{uv} também é semelhante (figuras 5.6b e 5.6d, respectivamente) e revela a importância do termo de produção na equação de transporte da tensão normal \overline{vv} (equação (5.5)).

A evolução da energia cinética da figura 5.7 para além de mostrar o efeito *desestabilizador* e *estabilizador* da curvatura (favorecendo ou impedindo o crescimento da energia cinética), revela também que a curvatura e o corte podem ser usados para aumentar a capacidade de transporte e de mistura turbulenta (utilizando a configuração de corte negativo), recorrendo a um raio de curvatura adequado (geralmente pequeno).

A evolução da anisotropia das tensões de Reynolds representada na figura 5.8, mostra que na entrada da primeira curva, as tensões de Reynolds apresentam uma anisotropia

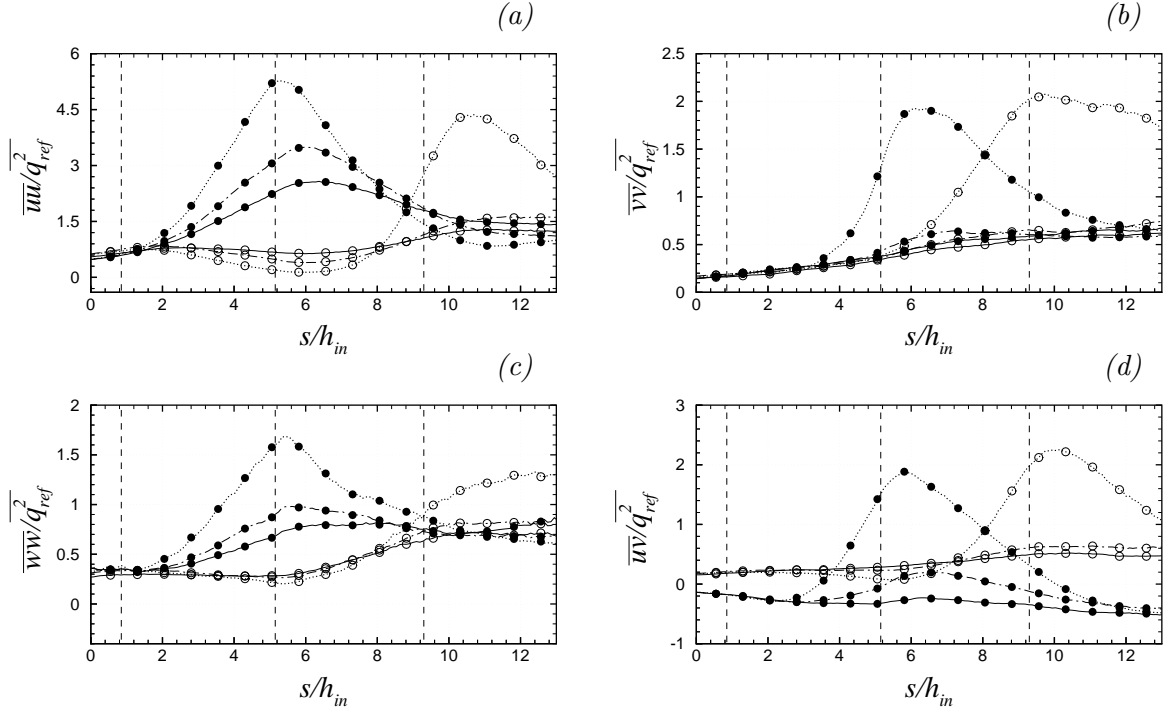


Figura 5.6: Evolução das tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura: $Rc = 3.5$ m (———), $Rc = 2$ m (· - · - ·) e $Rc = 1$ m (· · · · ·), considerando as configurações NEA e PEA. As linhas verticais indicam o local onde existe a mudança de curvatura e os símbolos (●) e (○) representam os resultados numéricos para o corte negativo e para o corte positivo, respectivamente.

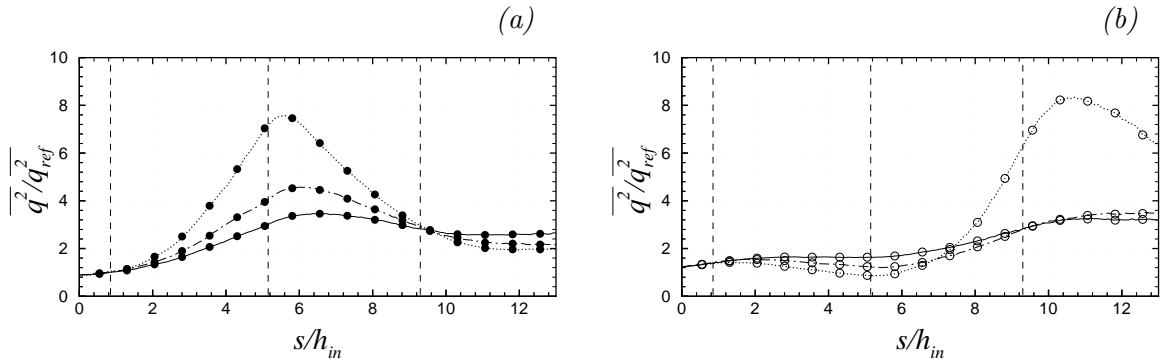


Figura 5.7: Evolução da energia cinética da turbulência $\overline{q^2}$ ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura: $Rc = 3.5$ m (———), $Rc = 2$ m (· - · - ·) e $Rc = 1$ m (· · · · ·), considerando as configurações NEA e PEA. O significado dos símbolos está na legenda da figura 5.6.

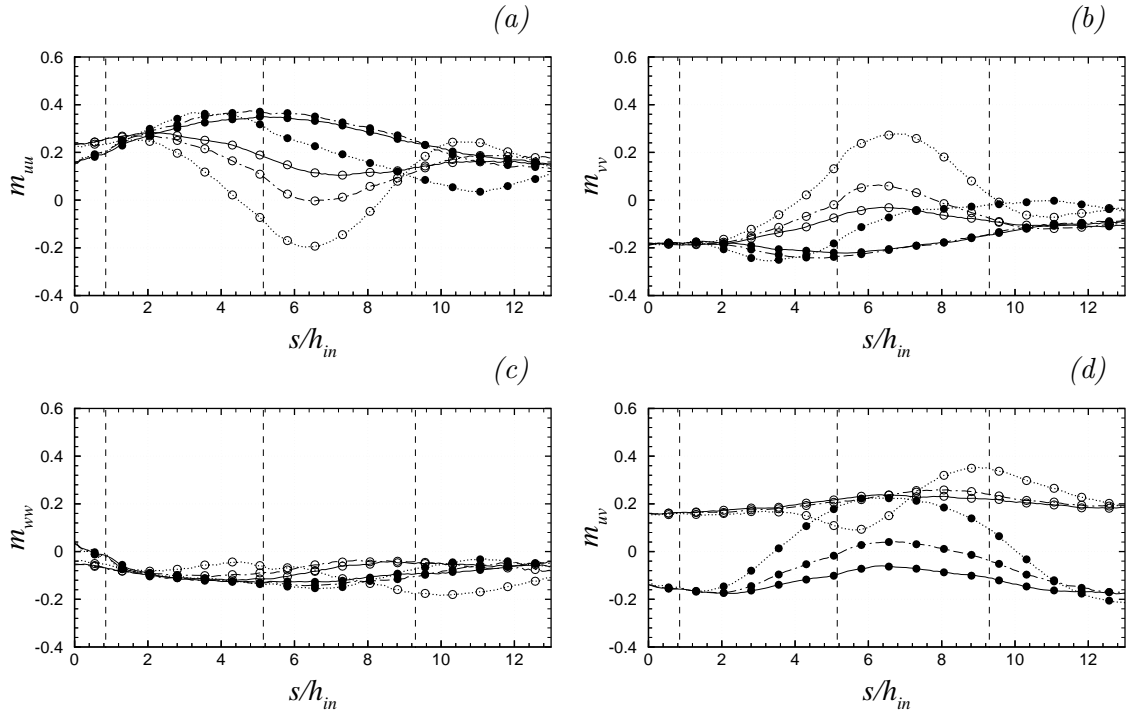


Figura 5.8: Evolução do tensor anisotrópico m_{ij} ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura: $R_c = 3.5$ m (———), $R_c = 2$ m (· - · - · -) e $R_c = 1$ m (· · · · ·), considerando as configurações NEA e PEA. O significado dos símbolos está na legenda da figura 5.6.

de aproximadamente 20%. Este valor é recuperado na saída da segunda secção curva, o que sugere que o escoamento recupera (em termos de isotropia das tensões de Reynolds) as características anteriores à sucessão de curvas. A anisotropia da tensão normal $\overline{w\overline{w}}$ (figura 5.8c) é insensível ao corte e à intensidade da curvatura. Este resultado não surpreende por se tratar da direcção homogênea do escoamento. Durante a passagem pelas secções curvas a anisotropia das tensões de Reynolds aumenta, especialmente no caso do corte positivo (situação da figura 5.2a). Confrontando a evolução da tensão normal $\overline{u\overline{u}}$ com a evolução da sua anisotropia (figura 5.8), verificamos que quanto maior for o valor da tensão normal (corte negativo na figura 5.6a) menor a sua anisotropia, e quanto menor for o valor da tensão normal (corte positivo na figura 5.6a) maior a sua anisotropia.

As tensões principais m_i ocorrem em planos com tensão de corte nula e estão orientadas segundo as direcções principais. A curvatura e o corte provocam alterações nas direcções principais e nos valores das tensões principais. Quando a curvatura não é acentuada ($R_c = 3.5$ m) a anisotropia das tensões principais e a anisotropia escalar não sofrem variações consideráveis, mas quando a curvatura é mais acentuada (e.g., $R_c = 1$ m) as variações têm maior significado (ver figura 5.9). Concentrando a nossa atenção na situação de maior curvatura ($R_c = 1$ m), podemos verificar que a tensão principal máxima σ_1 é

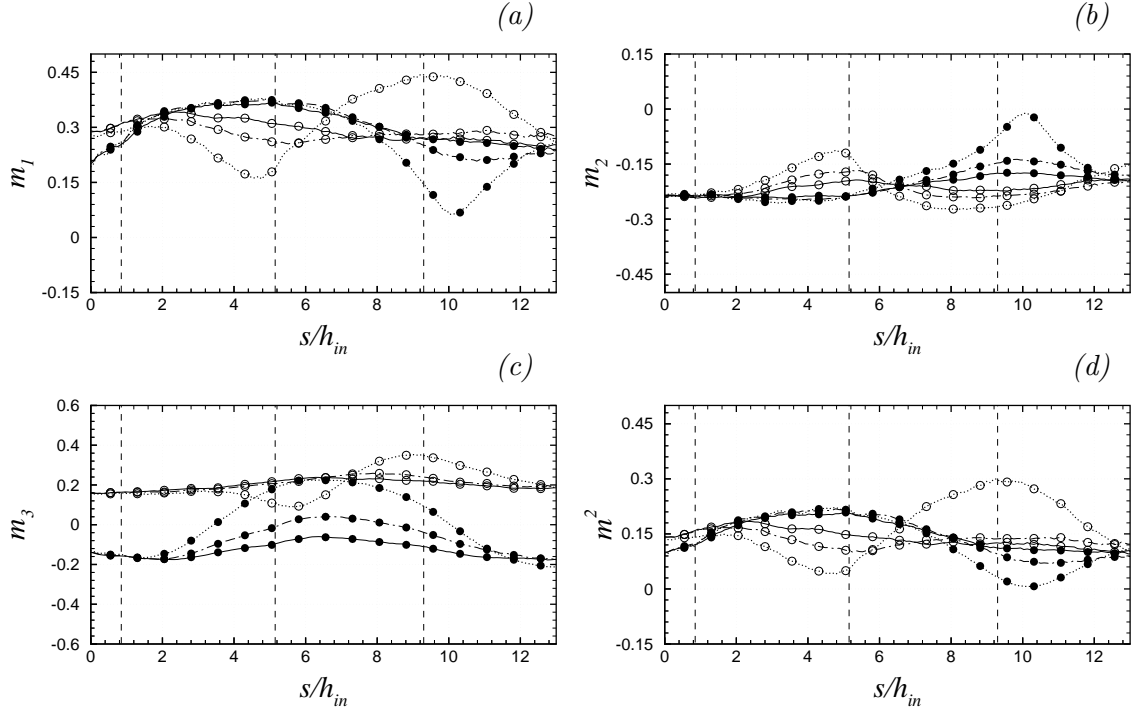


Figura 5.9: Evolução da anisotropia das tensões principais m_i e da anisotropia escalar m^2 ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura das secções curvas: $Rc = 3.5$ m (———), $Rc = 2$ m (- - - -) e $Rc = 1$ m (······), considerando as configurações NEA e PEA. O significado dos símbolos está na legenda da figura 5.6.

a componente que sofre maior variação de isotropia, sendo o termo mais importante na evolução da anisotropia escalar m^2 (m_1 e m^2 apresentam andamentos muito similares). Antes e depois das secções curvas os valores da anisotropia das tensões principais assumem valores praticamente iguais, no entanto, ao contrário da anisotropia das tensões de Reynolds, a recuperação da isotropia inicial (das tensões principais σ_i) é mais lenta e necessita de um comprimento de aproximadamente $3h_{in}$. A anisotropia da tensão principal máxima (figura 5.9a) mostra que quando o corte é negativo (primeira curva na configuração da figura 5.2b e segunda curva na configuração da figura 5.2a) a anisotropia aumenta e quando o corte é positivo (segunda curva na configuração da figura 5.2b e primeira curva na configuração da figura 5.2a) a anisotropia diminui. Este efeito é mais significativo na situação de curvatura acentuada (e.g., $R_c = 1$ m).

Pelo facto do escalar ser passivo, os fluxos escalares $\overline{u_i\phi}$ apresentam a mesma tendência da componente da velocidade responsável pelo transporte do fluxo escalar. Por exemplo, o fluxo escalar $\overline{u\phi}$ apresenta o mesmo andamento da tensão de Reynolds $\overline{u\bar{u}}$. O fluxo escalar mais importante é o fluxo $\overline{u\phi}$ e o fluxo $\overline{w\phi}$ é praticamente nulo (escoamento bidimensional). A figura 5.10 mostra que a curvatura favorece o crescimento da variância e dos fluxos escalares quando o corte e gradiente vertical do campo escalar são negativos, e impede o

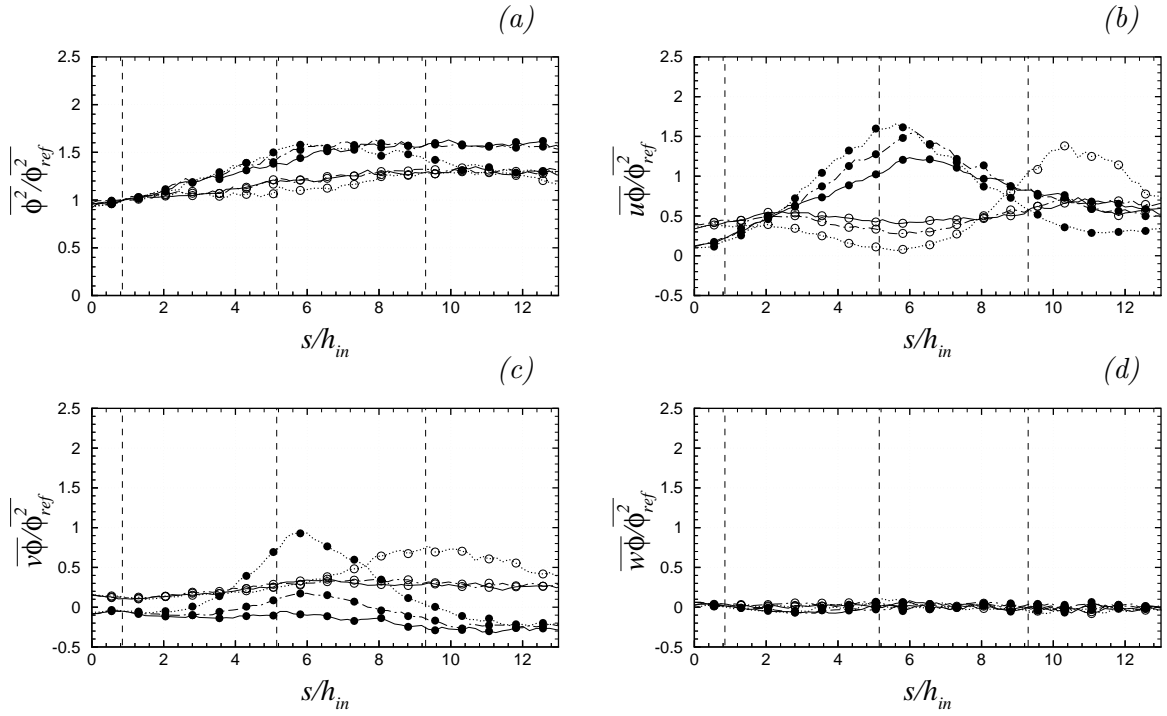


Figura 5.10: Evolução da variância escalar $\overline{\phi^2}$ e dos fluxos escalares $\overline{u_i\phi}$ ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura: $R_c = 3.5$ m (———), $R_c = 2$ m (- - - -) e $R_c = 1$ m (.....), considerando as configurações NEA e PEA. O significado dos símbolos está na legenda da figura 5.6.

seu crescimento ou promove o decaimento quando o corte e gradiente vertical do campo escalar são positivos. A evolução do fluxo escalar na direcção do escoamento (figura 5.10b) mostra que quanto maior for a curvatura (e.g., $R_c = 1$ m) maior o crescimento dos fluxos escalares durante a passagem pelas secções curvas.

A evolução do ângulo da direcção principal máxima α_1 com a direcção s ao longo da linha de eixo do canal (figura 5.11), revela que o ângulo entre a direcção s e a direcção principal de tensão depende da orientação do corte na entrada do canal: para corte positivo o ângulo é negativo ($\approx -20^\circ$), para corte negativo o ângulo é positivo ($\approx 20^\circ$). Este desalinhamento entre a direcção principal e a direcção s é atribuída à presença do corte. A curvatura contribui para amplificar o desalinhamento, sobretudo na situação de corte positivo, a qual regista um desalinhamento máximo de aproximadamente -52° no ponto de inflexão das secções curvas. Após a passagem pelas secções curvas a direcção principal volta a ter um desalinhamento de aproximadamente 20° com a direcção do escoamento (nas configurações de corte negativo e corte positivo). No caso do corte negativo ($R_c = 1$ m) existe um ponto ($s/h_{in} \approx 3,4$) onde a direcção principal máxima coincide com a direcção do escoamento, mas quando o corte é positivo isso nunca acontece e o ângulo α_1 é sempre negativo.

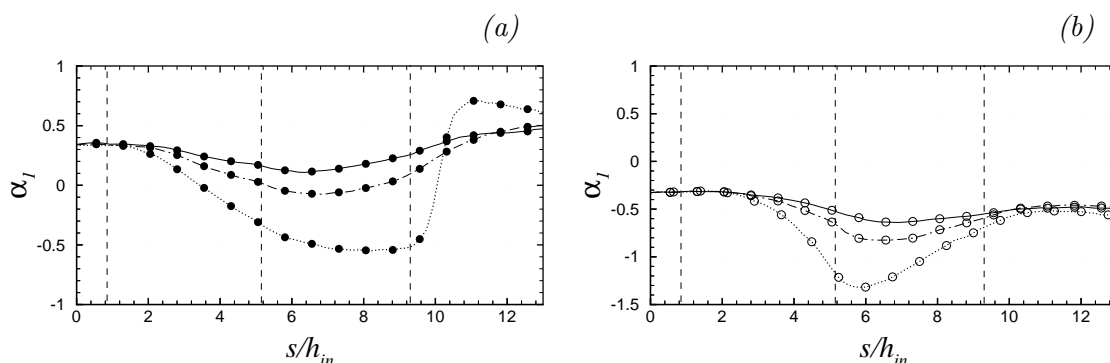


Figura 5.11: Evolução do ângulo da direcção principal máxima α_1 com a direcção s ao longo da linha de eixo do canal para diversos raios de curvatura: $Rc = 3.5$ m (—), $Rc = 2$ m (---) e $Rc = 1$ m (·····), considerando as configurações NEA e PEA. O significado dos símbolos está na legenda da figura 5.6.

5.3.3 Efeitos da Intensidade do Corte e do Gradiente Escalar na Turbulência

Para estudar o efeito da intensidade do corte e do gradiente vertical do campo escalar na turbulência efectuámos as simulações descritas nas tabelas (5.4-5.6), nas quais fizemos variar a intensidade do corte e do gradiente vertical do campo escalar, tendo como referência os resultados experimentais de Holloway and Tavoularis (1992) e as simulações NEAR35 e PEAR35.

A figura 5.12 mostra que quando o corte é negativo as tensões de Reynolds crescem de forma exponencial até ao ponto de inflexão das secções curvas. A partir deste local a curvatura muda de orientação, o que coloca o escoamento sob influência de corte positivo e as tensões de Reynolds decrescem até um valor próximo do valor previsto para um escoamento em canal plano sujeito ao mesmo gradiente vertical de velocidade. Na secção plana de entrada e quando o corte é positivo, as tensões de Reynolds crescem a uma taxa aproximadamente igual à da situação de corte negativo. Porém, na presença da primeira curva, as tensões de Reynolds decaem ou permanecem aproximadamente constantes (depende da intensidade do corte com a curvatura) até à entrada na segunda curva, altura em que o corte muda de sinal (tornando-se negativo), favorecendo o crescimento das tensões de Reynolds, tal como na primeira curva com corte negativo.

A energia cinética da turbulência (figura 5.13) pelo facto de ser um parâmetro global, permite ver qual o efeito do corte (positivo ou negativo) e da sua intensidade na turbulência de forma mais clara do que analisando as componentes das tensões de Reynolds. Quando o corte é negativo a energia cinética turbulenta aumenta; quando o corte é positivo a energia cinética permanece constante ou decai e o aumento da intensidade do corte favorece a amplificação da taxa de crescimento da energia cinética.

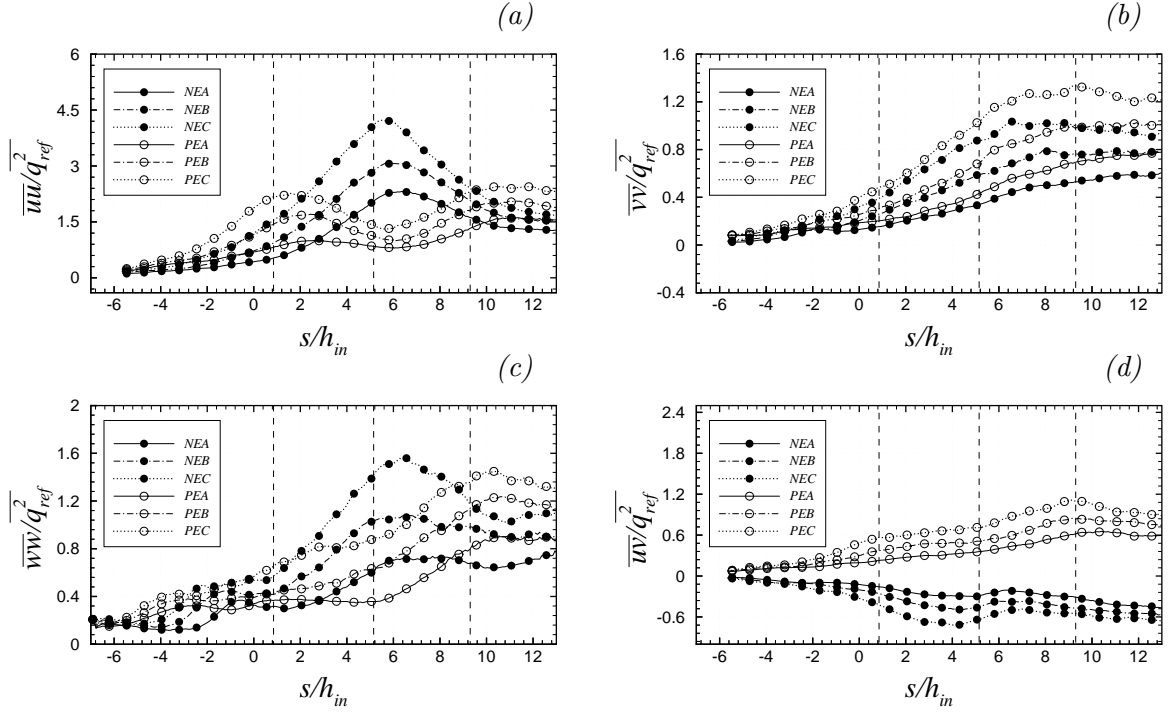


Figura 5.12: Evolução das tensões de Reynolds $\overline{u_i u_j}$ ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m. (●) representam os resultados obtidos pelo corte e gradiente escalar negativos ($S < 0$ e $s_\phi < 0$), (○) representam os resultados obtidos pelo corte e gradiente escalar positivos ($S > 0$ e $s > 0$). As linhas verticais indicam o local onde existe a mudança de curvatura.

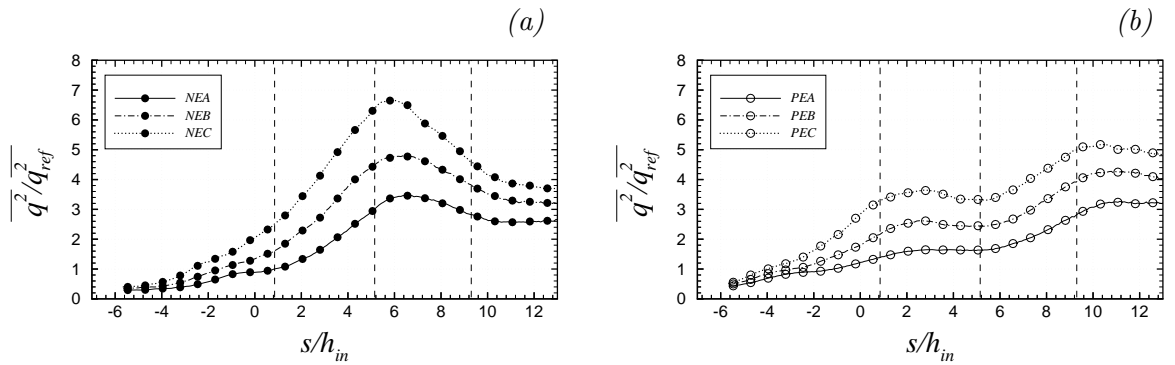


Figura 5.13: Evolução da energia cinética da turbulência $\overline{q^2}$ ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m para (a) corte negativo à entrada e para (b) corte positivo à entrada. As linhas verticais indicam o local onde existe a mudança de curvatura.

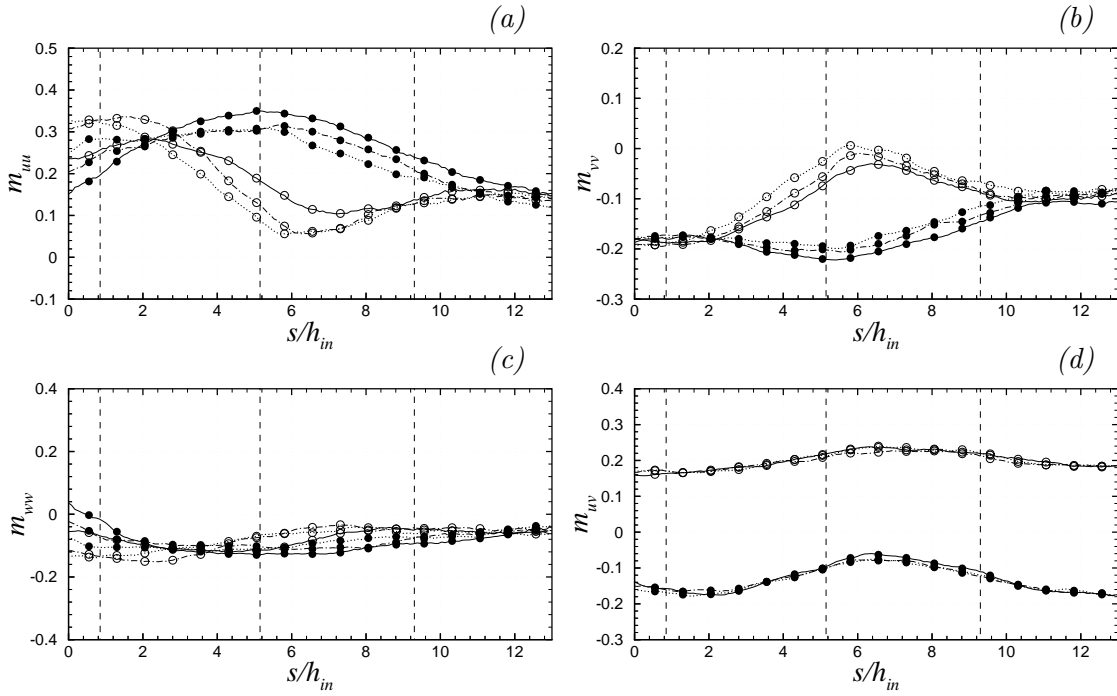


Figura 5.14: Evolução do tensor anisotrópico m_{ij} ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m. (—) NEA e PEA, (- - -) NEB e PEB e (·····) NEC e PEC. O significado dos símbolos está na legenda da figura 5.12

A evolução da anisotropia das tensões de Reynolds (figura 5.14) mostra que a anisotropia da tensão \overline{ww} não é afectada pela curvatura nem pelo corte (positivo ou negativo), permanecendo praticamente constante e igual a 10%. As tensões de Reynolds cuja isotropia é mais afectada pela curvatura são a tensão \overline{uu} e \overline{vv} : quando o corte é negativo a anisotropia aumenta e quando o corte é positivo a anisotropia diminui. O aumento da intensidade do corte faz aumentar a taxa de crescimento da anisotropia das tensões de Reynolds, especialmente na componente u e v . Durante a passagem das secções curvas regista-se um aumento da anisotropia da tensão \overline{vv} por diminuição da componente \overline{uu} .

A anisotropia das tensões principais e a anisotropia escalar (figura 5.15) são influenciadas pela curvatura e pela intensidade do corte: quando o corte é negativo a anisotropia aumenta e quando o corte é positivo a anisotropia diminui. Quanto maior for a intensidade do corte maior a taxa de crescimento do valor da anisotropia. Comparando a evolução da anisotropia das tensões principais para diversas intensidades de curvatura (figura 5.9), com a sua evolução para diversas intensidades de corte (figura 5.15), podemos ver que o efeito na anisotropia é semelhante, o que significa que podemos conseguir o mesmo efeito intervindo sobre o raio de curvatura ou sobre a intensidade do corte, como aliás mostra a equação 5.1.

O efeito da curvatura e da contra-curvatura na variância escalar e no fluxo $\overline{v\phi}$ não

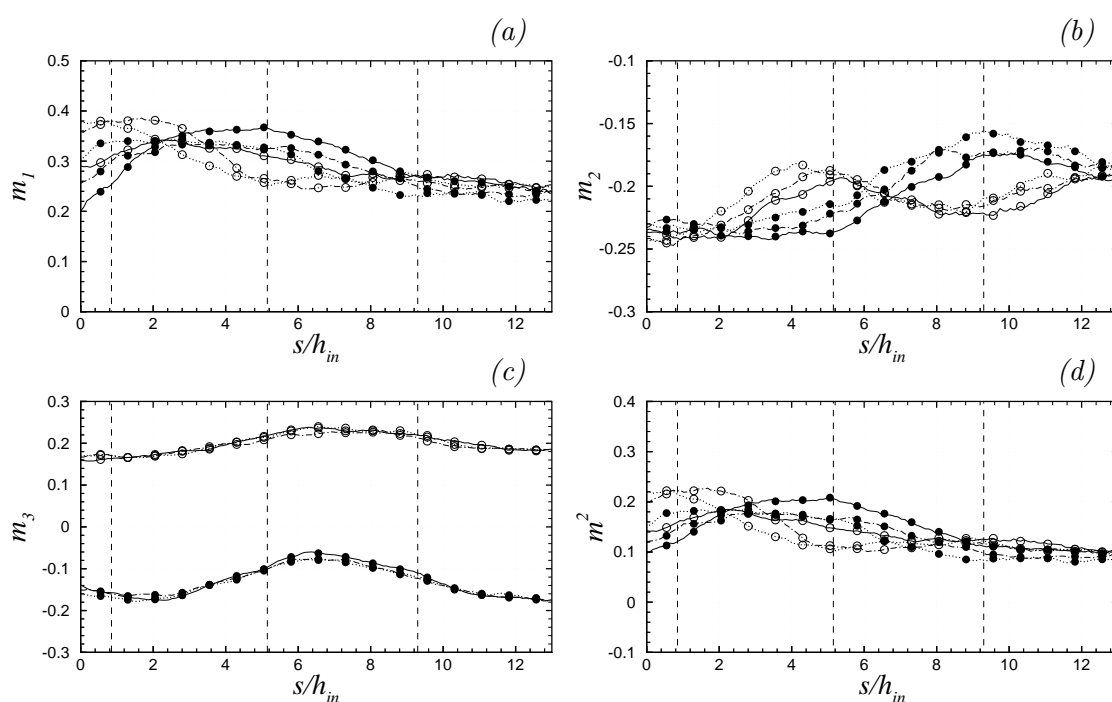


Figura 5.15: Evolução da anisotropia das tensões principais m_i e da anisotropia escalar m^2 ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m. (—) NEA e PEA, (- - -) NEB e PEB e (·····) NEC e PEC. O significado dos símbolos está na legenda da figura 5.12

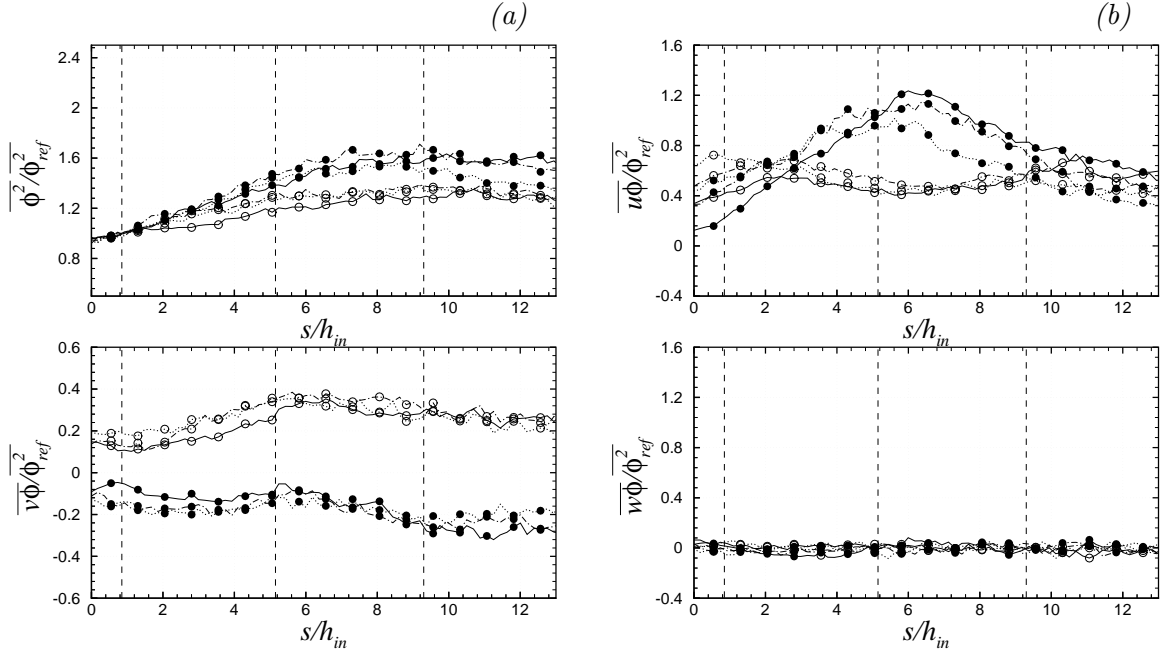


Figura 5.16: Evolução da variância escalar $\overline{\phi^2}$ e dos fluxos escalares $\overline{u_i\phi}$ ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m. (—) NEA e PEA, (- - -) NEB e PEB e (.....) NEC e PEC. O significado dos símbolos está na legenda da figura 5.12

é o mesmo que se observa no fluxo $\overline{u\phi}$ (figura 5.16). A variância escalar $\overline{\phi^2}$ cresce de forma aproximadamente linear à medida que o escoamento se desenvolve, registando valores superiores quando a intensidade do corte é mais elevada, ou quando o gradiente vertical do campo escalar e o corte estão orientados de acordo com a configuração 5.2b. O módulo do fluxo escalar $\overline{v\phi}$ permanece aproximadamente constante quando o corte é negativo e aumenta quando o corte é positivo. O fluxo $\overline{u\phi}$ apresenta o mesmo comportamento que a tensão de Reynolds \overline{uu} : aumenta quando o corte é negativo e diminui quando o corte é positivo. A evolução dos fluxos escalares está de acordo com o esperado, pois tratando-se de um escalar passivo, as flutuações da velocidade desempenham o principal papel no transporte e difusão do campo escalar.

A figura 5.17 mostra o efeito da curvatura e contra-curvatura e da intensidade do corte na direcção principal de tensão relativamente à direcção do escoamento. Verificamos que o módulo de α_1 aumenta na primeira curva e diminui na segunda. A intensidade do corte S favorece a diminuição do alinhamento da tensão principal máxima com a direcção do escoamento.

Na figura 5.18 representamos o campo médio escalar em planos paralelos às paredes do canal. Devido à existência de um gradiente vertical do campo escalar, os valores máximos do escalar passivo ocorrem na parede superior do canal (figura 5.18d). Nesta região, a predominância de estruturas escalares com concentração próxima de 0.5 é maior do que na

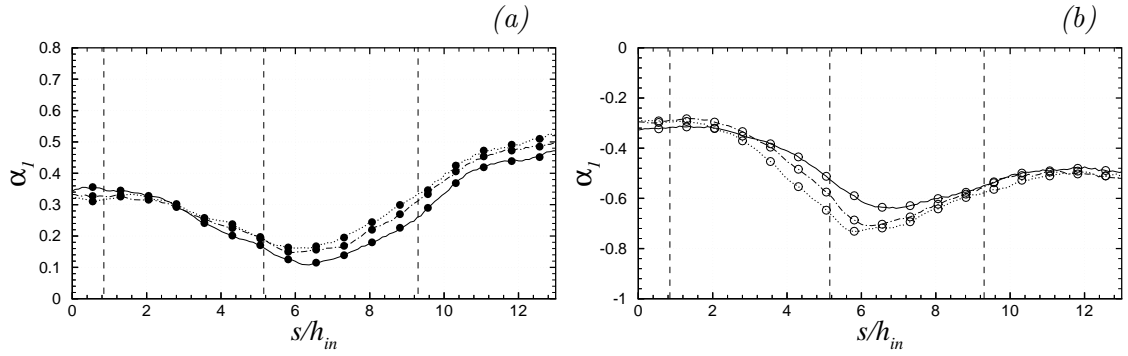


Figura 5.17: Evolução do ângulo da direcção principal máxima α_1 com a direcção s ao longo do eixo do canal com $Rc = 3.5$ m. (—) NEA e PEA, (· - · - ·) NEB e PEB e (· · · · ·) NEC e PEC. O significado dos símbolos está na legenda da figura 5.12

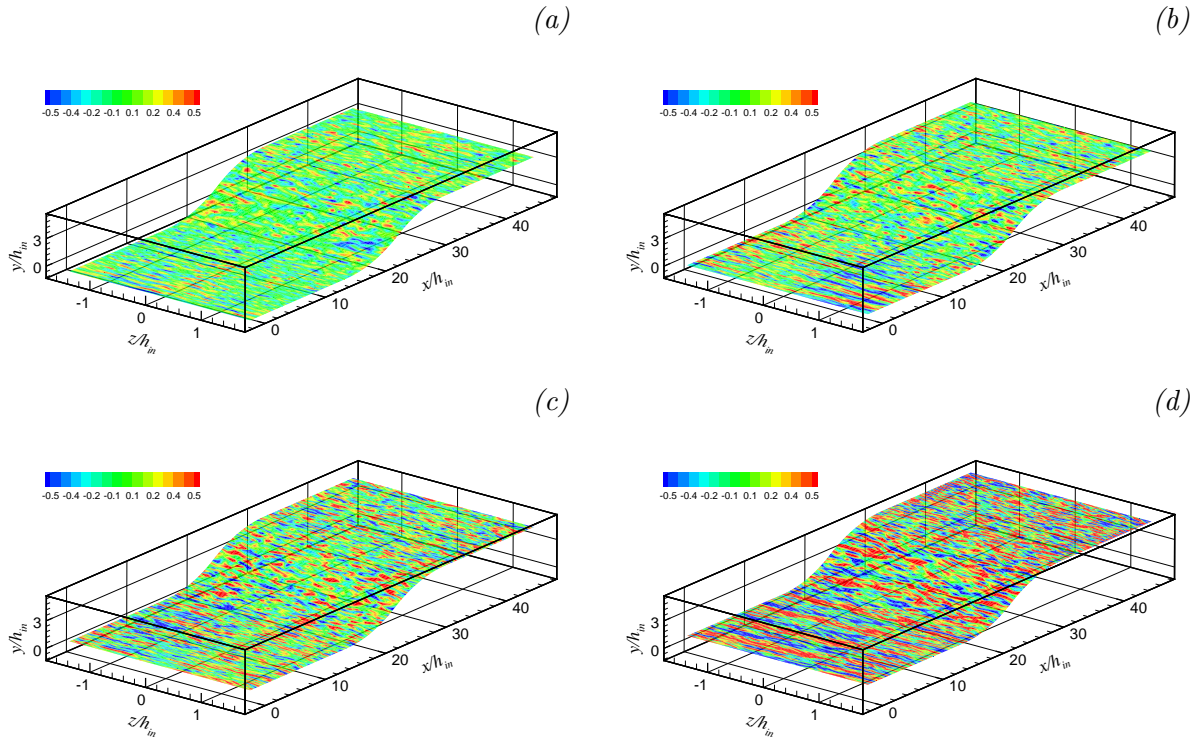


Figura 5.18: Campo médio escalar (simulação NEA) em planos perpendiculares ao eixo y , $Rc = 3.5$ m para (a) $n = -1$, (b) $n = -1/6$, (c) $n = 1/6$ e (d) $n = 1$.

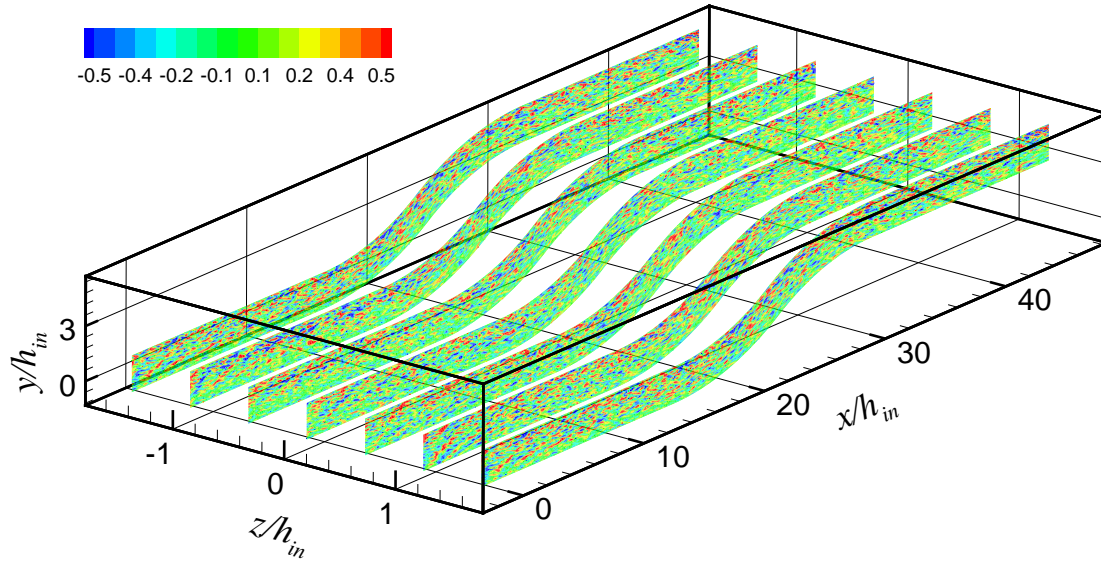


Figura 5.19: Campo médio escalar em planos perpendiculares a z , $Rc = 3.5$ m.

fronteira inferior (representada na figura 5.18a), onde a concentração escalar é aproximadamente igual a 0.1. Na figura 5.18d a predominância de valores negativos no campo escalar é maior do que no caso dos planos mais próximos da fronteira inferior, reforçando a ideia de que na fronteira superior a turbulência é maior.

Os planos verticais do campo médio escalar da figura 5.19 mostram que nas secções curvas as estruturas escalares aparecem “estiradas” na direcção do escoamento e o gradiente vertical do campo escalar parece ter menor intensidade após a sucessão de curvas do que na secção plana da entrada do canal.

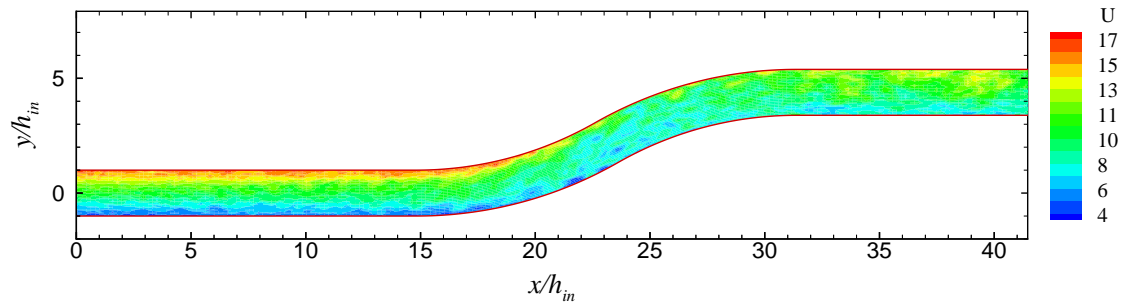


Figura 5.20: Campo médio de velocidade U no plano $z = 0$, $Rc = 3.5$ m.

Na figura 5.20 representamos o campo médio de velocidade U sujeito ao gradiente vertical de velocidade com corte negativo. Nesta configuração a velocidade é máxima na fronteira superior do canal e mínima na fronteira inferior. Quando entra na primeira curva a componente U da velocidade diminui por transferência para a componente V .

5.4 Conclusões

Estudaram-se os efeitos da mudança de curvatura e da intensidade do corte e da curvatura na turbulência e no transporte de escalares passivos, efectuando a simulação de um escoamento com corte e gradiente vertical do campo escalar no interior de um canal com dupla curvatura, utilizando a simulação das grandes escalas da turbulência (LES), com recurso ao modelo dinâmico Lagrangeano e a um sistema de coordenadas não-ortogonais.

As simulações foram efectuadas utilizando um número de Reynolds baseado na semialtura do canal (Re_b) igual a 68000 e número de Prandtl $Pr = 1$, considerando 18 intensidades de corte ($S \in [-0.1560; 0.044]$) e do gradiente escalar ($s_\phi \in [-1.557; 0.445]$), e vários raios de curvatura do canal iguais a: 1 m; 2 m e 3.5 m. Os campos de velocidade e escalar utilizados na entrada, foram obtidos numa simulação prévia. Nas fronteiras inferior e superior do canal utilizou-se fluxo escalar nulo e condição de escorregamento livre e na fronteira da saída a condição convectiva.

Comparámos os resultados numéricos com os experimentais e verificamos que as maiores diferenças registadas foram de aproximadamente 30%. Consideramos existirem três razões fundamentais que justificam as diferenças entre os resultados: (i) a necessidade de recorrer a um modelo de turbulência para efectuar as simulações, o qual não garante uma previsão totalmente adequada para as tensões de *submalha*; (ii) a condição de entrada usada nas simulações difere da condição experimental por razões de dificuldades numéricas e (iii) em nosso entender, o degrau utilizado na entrada da primeira curva do trabalho experimental não impede o desenvolvimento da camada limite nas secções curvas do canal, gerando-se um gradiente longitudinal de pressão, o qual provoca alterações sobre o campo turbulento.

A curvatura e contra-curvatura e a sua intensidade, bem como a intensidade do corte e do gradiente vertical do campo escalar, provocam alterações diversas na turbulência dos escoamentos (e.g., a nível das tensões de Reynolds e da sua anisotropia, na anisotropia das tensões principais e na sua orientação relativamente à direcção s do escoamento e na evolução dos fluxos e da variância escalares), promovendo o aumento da intensidade da turbulência dos escoamentos quando o corte e a curvatura são negativos e diminuindo a sua intensidade quando o corte e a curvatura são positivos.

Após a passagem pelas secções curvas e por efeitos do corte os escoamentos apresentam maior energia cinética turbulenta, e por isso, com maior capacidade de transporte e de mistura turbulenta. Contudo, as características do escoamento antes e após as secções curvas podem ser semelhantes ou distintas. Nas situações de menor curvatura ($R_c =$

3.5 m), a anisotropia do escoamento e a orientação entre a direcção principal máxima e a direcção s do escoamento sofreram alterações provocadas pela curvatura e contra-curvatura mas recuperaram no final das secções curvas praticamente os mesmos valores que tinham na entrada da primeira curva. Por outro lado, nas situações de maior curvatura ($R_c = 2$ m e $R_c = 1$ m) ou de maior intensidade de corte e gradiente escalar os efeitos sobre a turbulência são mais importantes e os escoamentos perdem as características iniciais após a passagem pelas secções curvas, tornando-se mais anisotrópicos e com orientações das direcções principais máximas face à direcção s dos escoamentos diferentes.

Capítulo 6

Conclusões e Trabalho Futuro

6.1 Conclusões

Efectuámos a simulação de vários escoamentos turbulentos utilizando a simulação numérica directa (DNS–*Direct Numerical Simulation*) e a simulação das grandes escalas da turbulência (LES–*Large Eddy Simulation*).

Com recurso à simulação numérica directa (DNS) e a um sistema de coordenadas não-ortogonais com discretização por volumes finitos, simulámos o transporte de escalares passivos em turbulência isotrópica, forçada e em decaimento, e sujeita a corte e gradiente vertical do campo escalar. Os cálculos foram efectuados num cubo periódico com graus de distorção diversos, com um número de Reynolds turbulento baseado na microescala de Taylor de 40 e número de Prandtl igual a 0.7 e 10. A distorção intencional do domínio de cálculo teve por objectivo averiguar a aptidão das técnicas numéricas utilizadas em lidar com problemas envolvendo o transporte de escalares passivos em geometrias complexas. As simulações partiram de campos iniciais isotrópicos com distribuições Gaussianas e variância idêntica para a velocidade e o campo escalar. Os resultados mostraram que nem a isotropia dos campos nem o alinhamento do gradiente escalar com a vorticidade e as taxas de deformação foram modificados com a distorção do domínio de cálculo. Todas as funções densidade de probabilidade (PDF–*Probability Density Function*) obtidas em domínios distorcidos se sobrepuseram dando origem a uma PDF única. Os resultados obtidos permitiram concluir que os métodos numéricos utilizados são adequados e o programa de cálculo pode ser usado na resolução de problemas de maior complexidade física e geométrica.

Através da simulação das grandes escalas da turbulência (LES) de um escoamento no interior de um canal com curvatura e gradiente vertical de velocidade, com número de Reynolds baseado na semialtura do canal (Re_b) igual a 68000, estudou-se a forma mais adequada de simular este tipo de escoamentos, visando conhecer melhor os efeitos do corte e da

curvatura na turbulência. Testámos três condições de entrada para o campo de flutuações turbulentas: (i) campo Gaussiano; (ii) campo Gaussiano com correlações de velocidade prescritas e (iii) campo obtido através de uma simulação prévia num cubo de turbulência isotrópica. A terceira condição tem a vantagem de permitir definir alguns parâmetros físicos (e.g., o número de Reynolds e os momentos estatísticos do campo turbulento) e garante resultados melhores. Estudámos o efeito das médias e da malha na simulação. Concluiu-se que para atingir o estado estatisticamente estacionário, é necessário deixar o escoamento desenvolver durante 6 s para podermos iniciar as médias, as quais devem ser efectuadas durante 6 s. De todas as malhas usadas, verificou-se que uma malha com 32×32 nós na direcção transversal foi insuficiente, enquanto que os resultados obtidos usando 64×64 nós são praticamente coincidentes entre si. Os resultados numéricos apresentam concordância com os experimentais, sobretudo a nível na energia cinética da turbulência. Confirmou-se que na zona recta, as tensões de Reynolds crescem fruto da transferência de energia do campo médio para o campo turbulento por acção do corte e que na zona curva, existe também o efeito da curvatura que amplifica as tensões de Reynolds a uma taxa superior. Quando a curvatura e o corte apresentam sinais contrários (corte negativo), observaram-se condições favoráveis ao crescimento da intensidade da turbulência, quando a curvatura e o corte apresentam o mesmo sinal (corte positivo) a intensidade da turbulência diminui.

Simulámos as grandes escalas da turbulência (LES) de escoamentos com corte e gradiente vertical escalar no interior de um canal com dupla curvatura, com número de Reynolds baseado na semialtura do canal (Re_b) igual a 68000 e estudámos os efeitos da mudança de curvatura e da intensidade do corte e da curvatura na turbulência e no transporte de escalares passivos. Considerámos diferentes intensidades de corte e do gradiente escalar e vários canais com raios de curvatura iguais a 1, 2 e 3.5 metros. Comparámos os resultados numéricos com os experimentais, tendo sido registadas diferenças máximas de aproximadamente 30%. Estas diferenças ocorrem devido a dificuldades em ajustar as condições numéricas e experimentais, nomeadamente: (i) a condição de entrada usada nas simulações difere da experimental por razões de natureza numérica e (ii) o degrau utilizado na entrada da primeira curva no trabalho experimental não impede o desenvolvimento da camada limite nas secções curvas, gerando-se assim um gradiente longitudinal de pressão que provoca alterações sobre o campo turbulento. A curvatura e contra-curvatura provocam alterações no campo turbulento durante a passagem pelas secções curvas: no caso da curvatura acentuada ($Rc = 1$ m e $Rc = 2$ m) a anisotropia e a direcção principal máxima registadas no final da segunda curva são diferentes das registadas no início da primeira curva; quando a curvatura é menos acentuada ($Rc = 3.5$ m) ou nas situações de corte moderado (e.g., $S = 0.033$, $S = 0.038$) os valores destes parâmetros no início da primeira e no final da segunda curva são aproximadamente iguais, neste caso os escoamentos recuperam as características iniciais. A curvatura e contra-curvatura e a sua intensidade, bem como a intensidade do corte e do gradiente vertical do campo escalar, provocam alterações diversas na turbulência (e.g., a nível das tensões de Reynolds e da sua anisotropia, na anisotropia das tensões principais e na sua orientação e na evolução dos fluxos e da variância escalares), promovendo o aumento da intensidade da turbulência dos escoamentos quando o corte e a

curvatura são negativos e diminuindo a sua intensidade quando o corte e a curvatura são positivos.

A simulação das grandes escalas da turbulência (LES) de um escoamento com corte num canal com curvatura e elevado número de Reynolds ($Re_b = 68000$), revelou que a condição convectiva de saída de Orlanski (1976) é inadequada para simular escoamentos com fortes gradientes em saídas inclinadas, mostrando-se incapaz de impedir a sua reflexão para montante e deturpação dos resultados. Verificámos que podemos melhorar o desempenho da condição de Orlanski: (i) recorrendo a uma determinação local da velocidade convectiva; (ii) usando malhas que expandem na direcção da saída (a malha funciona como um filtro de instabilidades); (iii) baixando a ordem de precisão aplicada ao plano na saída (e.g., substituindo o esquema Runge-Kutta (4,3) pelo método de Euler explícito de 2ª ordem) ou (iv) utilizando gradiente longitudinal nulo, que do ponto de vista numérico revelou ser tão estável como a condição de saída resolvida usando discretização por Euler explícito. Em qualquer das quatro condições testadas as maiores instabilidades ocorrem nas paredes (fronteiras). No caso da condição de Orlanski com determinação local da velocidade de convecção, as instabilidades foram maiores onde a velocidade local é mais elevada.

6.2 Trabalho Futuro

Aproveitamos a oportunidade para traçar as linhas de orientação segundo as quais pensamos ser possível progredir, tendo como objectivo a simulação de escoamentos turbulentos de maior complexidade, procurando respostas cada vez mais rápidas e seguras. Consideramos que este trabalho pode ser desenvolvido nos seguintes aspectos: (i) modelação física e complexidade geométrica, (ii) desempenho computacional e (iii) precisão e estabilidade.

Modelação Física e Complexidade Geométrica

Do ponto de vista físico, importa melhorar os aspectos que nos parecem condicionar a aproximação entre resultados experimentais e numéricos: (i) testar modelos de submalha alternativos; (ii) procurar outras formas de gerar a condição de entrada e (iii) estudar o efeito da camada limite do escoamento nos resultados.

O efeito da presença da camada limite pode ser estudado provocando um gradiente longitudinal de pressão negativo, utilizando um canal com uma contracção nas paredes ou incluindo a camada limite no trabalho numérico (substituindo a condição de escorregamento livre nas paredes do canal pela de não-escorregamento). Contudo, a primeira das soluções é preferível pelo facto de não exigir refinamento da malha junto das paredes. A realização deste trabalho justifica-se pela necessidade de esclarecer a existência da camada limite no trabalho experimental.

Procurar alternativas que melhorem as condições de entrada utilizadas neste trabalho, parece-nos uma boa solução para melhorar os resultados obtidos pela via da simulação computacional. Tivemos oportunidade de ver que as tensões de Reynolds calculadas a partir de um campo obtido numa simulação prévia e usado para estabelecer a condição de entrada, não permanecem constantes na secção de entrada (decaem ou crescem de forma descontrolada), necessitando de um comprimento aproximadamente igual a meia altura do canal para recuperar. Este não é um problema novo (e.g., Lund et al., 1998), contudo tem recentemente despertado maior interesse (e.g., Keating et al., 2004) devido aos desenvolvimentos nos métodos computacionais e capacidade de cálculo, o que tem permitido estudar problemas de engenharia de maior complexidade. O estudo deste problema pode ser efectuado realizando simulações em canal plano sem camada limite (simplificando o problema do ponto de vista físico, geométrico e tornando-o menos exigente em termos de cálculo), comparando os espectros de velocidade e pressão em diversas secções ao longo do eixo do canal.

Desempenho Computacional

O desempenho computacional do programa pode ser melhorado com recurso à computação paralela. A paralelização do programa significa (i) poder usar malhas mais finas e (ii) obter resultados em menor tempo de cálculo. O algoritmo de resolução dos sistemas de equações (*solver*) pode consumir praticamente 50% do tempo de cálculo na realização da simulação, o que significa que a escolha de um *solver* mais eficiente também pode contribuir para um melhor desempenho do programa de cálculo. São conhecidas duas possibilidades de paralelização: actuando apenas no algoritmo de resolução dos sistemas de equações ou por decomposição do domínio de cálculo. A segunda possibilidade permite geralmente maior eficiência, mas apresenta maior dificuldade de implementação.

Precisão e Estabilidade

O aumento da precisão pode ser conseguido à custa (i) da utilização de malhas mais finas ou (ii) aumentando a ordem de aproximação das derivadas que aparecem nos termos convectivos e difusivos das equações de transporte e escalar. Desta forma, é de esperar que os problemas que se verificaram nos cantos do domínio de cálculo (cubo de turbulência isotrópica) na simulação do transporte escalar passivos com corte e gradiente vertical escalar (capítulo 3) possam diminuir ou mesmo ser eliminados.

Em síntese, o desempenho do programa de cálculo utilizado (do ponto de vista da física e computacional) está dependente dos desenvolvimentos conseguidos em alguns temas de investigação actuais (e.g., modelos de *submalha*; paralelização de algoritmos; resolução de sistemas de equações lineares; esquemas de discretização temporal e espacial, entre outros), os quais podem contribuir para a melhoria deste programa.

Apêndice A

Condição Convectiva de Saída na Simulação das Grandes Escalas da Turbulência

Resumo do Apêndice

A forma mais adequada de tratar a condição de saída na simulação numérica de um escoamento turbulento no interior de um canal depende da complexidade geométrica do problema, em especial nas proximidades da secção de saída. No presente apêndice mostra-se como a condição de Orlanski é inadequada na simulação do escoamento com elevado número de Reynolds e gradiente vertical de velocidade ao longo de um canal curvo com a saída inclinada a 1 rad, usando esquemas numéricos de 2ª ordem para a discretização espacial e integração temporal com recurso ao método de Runge-Kutta (4,3) de quatro sub-passos e de 3ª ordem. O escoamento na entrada é caracterizado por um número de Reynolds baseado na microescala de Taylor e um número de corte igual a 280 e 1.5, respectivamente. Procurámos soluções alternativas à condição de Orlanski e mostramos que esta pode ser melhorada efectuando a determinação local da velocidade de convecção. O estudo desenvolveu-se recorrendo a versões simplificadas da equação de convecção-difusão e à análise de estabilidade de von Neumann para determinação das condições de estabilidade e validação posterior através da sua utilização no cálculo do escoamento no interior de um canal com curvatura longitudinal. Mostramos ainda que esquemas de discretização mais simples, como por exemplo Euler explícito (2ª ordem) ou gradiente nulo, revelaram maior estabilidade do que esquemas de ordem superior do tipo Runge-Kutta (4,3).

A.1 Introdução

A designada condição de Orlanski (1976) é a forma mais comum de condição convectiva na modelação de escoamentos turbulentos, com recurso à simulação das grandes escalas da turbulência (LES—*Large Eddy Simulation*). O objectivo da condição convectiva na saída é promover o transporte das instabilidades numéricas ou físicas aí geradas expulsando-as para fora do domínio de integração, impedindo a sua reflexão para montante e deturpação dos resultados.

A condição de saída pode ser estudada sob o ponto de vista da (i) precisão, (ii) estabilidade e dos (iii) recursos computacionais. Os três critérios são difíceis de aplicar em simultâneo, contudo algumas observações gerais podem ser feitas. A precisão da solução numérica é de importância vital e é geralmente aumentada usando: (i) malhas mais finas e (ii) interpolações de ordem elevada. A estabilidade dos métodos depende sobretudo do tipo de solução numérica adoptado (e.g., explícito, implícito ou semi-implícito). Um método que não seja estável num conjunto alargado de problemas é pouco competitivo do ponto de vista prático. Os recursos computacionais são muitas vezes determinantes nestes problemas, mas apesar do crescente desempenho dos computadores, estes continuam a ser insuficientes para resolver todas as escalas em escoamentos com elevado número de Reynolds. Assim, um método que para conseguir a mesma precisão implique menos memória e tempo de computação é preferido face aos seus concorrentes.

Surgiram outras alternativas à condição de Orlanski por intermédio de Miller and Thorpe (1981) e Raymond and Kuo (1984), as quais tinham por base a condição de Orlanski com condição CFL (*Courant-Friedrichs-Lewy*) diferente, usando pontos do interior do domínio em instantes de tempo anteriores. O objectivo destas propostas de Miller and Thorpe (1981) e Raymond and Kuo (1984) era melhorar o desempenho da condição de saída em termos de precisão e estabilidade. Como mostram Givoli and Neta (2002), a qualidade da solução numérica depende em certa medida das propriedades da condição de fronteira de saída, porque qualquer modificação local da velocidade na saída é extendida a todo o domínio por influência da pressão.

A condição convectiva não se aplica apenas na simulação de escoamentos turbulentos, é usada também noutros problemas, como sejam modelos de mesoescala, fenómenos atmosféricos e acústicos, sendo considerada por Miller and Thorpe (1981) um dos problemas computacionais mais complexos e que ainda estão por resolver. Apesar dos muitos estudos dedicados a este tópico, é difícil estabelecer uma condição de saída que resolva todas as situações do ponto de vista de precisão, estabilidade e facilidade de implementação. As dificuldades são acrescidas quando se tratam problemas tridimensionais com geometria complexa.

No presente apêndice dá-se conta das dificuldades encontradas na utilização de um programa de cálculo previamente desenvolvido por Lopes (2000) (e validado em problemas com geometria complexa, como por exemplo, a simulação de um escoamento turbulento

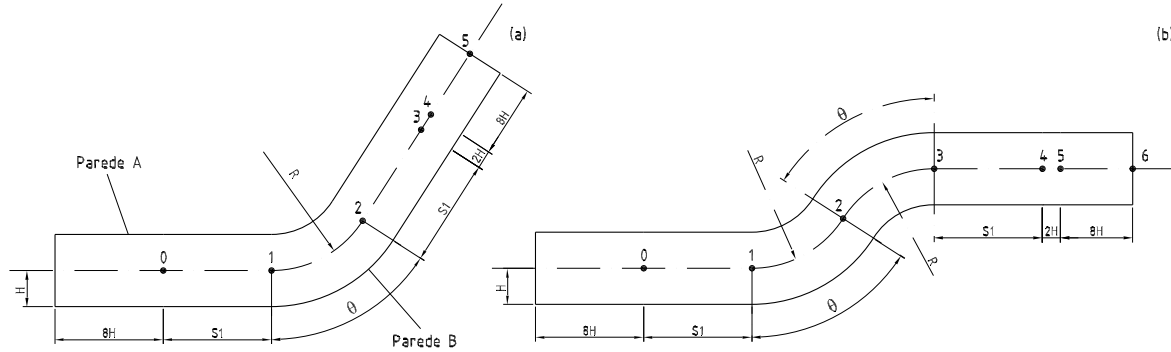


Figura A.1: Geometria (a) do canal com curvatura e (b) do canal em S ($H = 0.120$ m; $S1 = 1.820$ m; $R = 2$ m).

no interior de um canal com dupla curvatura (Lopes et al., 2003)), na simulação de um escoamento com corte e curvatura (curva simples), sendo que a secção de saída não estava alinhada com a direcção principal do escoamento, revelando a fragilidade da condição de saída de Orlanski e a necessidade de procurar alternativas mais adequadas.

A.2 Descrição Matemática

A.2.1 Modelo Matemático

O modelo matemático foi constituído pela equação da continuidade (2.9) e equações de Navier-Stokes (2.10), as quais foram discretizadas usando as técnicas numéricas referidas na secção 2.3 e resolvidas usando a metodologia da simulação das grandes escalas da turbulência (LES—*Large Eddy Simulation*) descrita na secção 2.2.2.

A.2.2 Domínio de Cálculo e Malha

Os domínios de cálculo utilizados foram um canal curvo e um canal em S, ambos com $2H = 0,240$ m de altura e secção inicial recta idêntica, estão representados na figura A.1 e são semelhantes aos usados nos trabalhos experimentais de Holloway and Tavoularis (1992) e Ahmed (1993). A secção inicial recta, a altura e os raios de curvatura eram idênticos nos dois canais e o ângulo θ foi 1 radiano. A malha usada para o canal curvo tinha $160 \times 25 \times 25$ nós (na direcção longitudinal, normal à parede e transversal, respectivamente), com espaçamento uniforme nas direcções transversal e normal à parede e com expansão de 5% na direcção longitudinal na parte final do último troço recto (pontos 4 e 5 da figura A.1a, e pontos 5 e 6 da figura A.1b).

A.2.3 Condição Inicial

A simulação iniciou-se a partir de um perfil médio linear com gradiente vertical de velocidade, dU/dz sobre o qual sobrepusemos um campo de flutuações aleatórias calculado conforme descrito no apêndice A do trabalho de Lund et al. (1998).

O campo de flutuações aleatórias tinha tensões de Reynolds $R_{ij}(y) = \langle u_i u_j \rangle_{z,t}$ que foram definidas de acordo com o trabalho experimental de Holloway and Tavoularis (1992). u_i representam as flutuações da velocidade ($\langle u_i \rangle_{z,t} = 0$) e o operador $\langle \rangle_{z,t}$ representa a média temporal e na direcção z . Em cada passo no tempo, a condição de entrada é gerada em todos os pontos sobre a direcção y . Para cada ponto é efectuada a seguinte sequência:

1. Três sequências de números aleatórios $\tilde{u}(z), \tilde{v}(z), \tilde{u}(w)$, são geradas. Cada distribuição tem média e covariância zero e variância igual a 1 (i.e., $\langle \tilde{u}_i \tilde{u}_i \rangle_z = 0$ para $i \neq j$).
2. O campo de velocidade foi construído da seguinte forma, $u_i(y, z) = U_i(y) + a_{ij} \tilde{u}_j(z)$, onde os elementos da amplitude do tensor a_{ij} são determinados via tensor das tensões de Reynolds,

$$\begin{aligned}
 a_{11} &= \sqrt{R_{11}}, \\
 a_{21} &= R_{21}/a_{11}, \\
 a_{22} &= \sqrt{R_{22} - a_{21}^2}, \\
 a_{31} &= R_{31}/a_{11}, \\
 a_{32} &= (R_{32} - a_{21}a_{31})/a_{22}, \\
 a_{33} &= \sqrt{R_{33} - a_{31}^2 - a_{32}^2}.
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Os restantes elementos a_{ij} são zero.

A.2.4 Condições de Fronteira

Nas fronteiras (paredes) superior e inferior usámos condição de fronteira de escorregamento livre. Na direcção transversal utilizaram-se condições periódicas.

Para determinar qual a condição convectiva (de saída) mais adequada para tratar este problema, o objectivo principal deste trabalho, usámos diversas condições de saída, combinadas com vários esquemas de discretização temporal e espacial. A condição-A, que corresponde à designada condição de Orlanski (1976), consistiu na resolução da equação de convecção,

$$\partial\phi/\partial t = -C_\phi \partial\phi/\partial x, \tag{A.2}$$

com velocidade de convecção C_ϕ constante e igual à velocidade média do escoamento no canal. Na condição-B a velocidade de convecção C_ϕ foi determinada localmente, tal como

em Raymond and Kuo (1984),

$$C_\phi = -\frac{\partial\phi}{\partial t} \frac{\partial\phi}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial z} \right)^2 \right]^{-1}, \quad (\text{A.3})$$

e a condição-C foi de gradiente longitudinal nulo de velocidade. Dado que o esquema de discretização temporal Runge-kutta (4,3) é de terceira ordem de precisão e as derivadas espacial nas fronteiras são de primeira ordem, resolvemos usar ainda um esquema do tipo Euler explícito de primeira ordem (condição-D), cuja discretização foi feita da seguinte forma:

$$\phi_n^{t+1} = \phi_n^t - C_\phi \frac{\Delta t}{\Delta x} (\phi_n^t - \phi_{n-1}^t), \quad (\text{A.4})$$

onde ϕ representa uma variável genérica, t o instante de tempo e n o ponto da fronteira de saída.

A.3 Análise dos Resultados

Na secção A.3.1 mostramos as dificuldades da condição de Orlanski em resolver a condição de saída no problema estudado (canal com curvatura e gradiente vertical de velocidade) e as melhorias encontradas quando a velocidade de convecção é determinada localmente. Na secção A.3.2 utilizaram-se os diagramas de estabilidade obtidos pela análise de estabilidade de von Neumann na determinação do domínio de estabilidade de cada método aplicado à condição de saída e na secção A.3.3 apresentamos dois métodos que constituem uma alternativa à condição de Orlanski, os quais revelaram ser mais adequados à resolução deste problema.

A.3.1 Determinação Local da Velocidade de Convecção na Saída

A figura A.2 foi obtida num canal com curva (figura A.1a), com condição de saída de Orlanski após 70 iterações a que correspondem 0.07 s de tempo real. Neste instante, a amplitude das oscilações de velocidade u e v atingem valores demasiado elevados. Estes valores aumentam com o decorrer da simulação, afectando uma região cada vez maior do domínio de cálculo (avançam para montante no sentido oposto ao escoamento) os quais conduzem, caso a simulação prossiga, a velocidades negativas (entrada de fluido por aquela que é uma secção de saída) e ao “rebentar” do cálculo. Nas mesmas condições, mas com a geometria do canal em S (figura A.1b), não se observaram oscilações até 8 s. Deste modo, a condição de Orlanski necessita de uma correcção para poder ser aplicada a situações em que a secção de saída não está alinhada com qualquer das direcções Cartesianas.

Foram tentadas algumas soluções expeditas, como por exemplo, o aumento da velocidade de convecção C_ϕ , igualando esta à velocidade máxima do escoamento em vez de

utilizar a sua velocidade média. Isto contribuiu apenas para retardar o “rebentamento” do cálculo, revelando não ser solução para o problema.

Avançou-se para outras alternativas em que a velocidade de convecção foi determinada localmente de acordo com a equação (A.3), cujo resultado mostramos na figura A.3 representando 1 s de tempo real. Trata-se de uma melhoria relativamente à condição de Orlanski, porque as oscilações são de menor amplitude e não conduzem ao “rebentamento” do cálculo.

O problema com a determinação local da velocidade de convecção ocorre sobretudo junto às paredes (tal como no trabalho de Raymond and Kuo (1984) e no de Miller and Thorpe (1981)) onde tentamos, sem sucesso, usar gradiente de velocidade longitudinal nulo. Contudo, acreditamos que esta alternativa possa ser melhorada na aplicação de restrições da velocidade de convecção e também a nível de resolução da malha na saída.

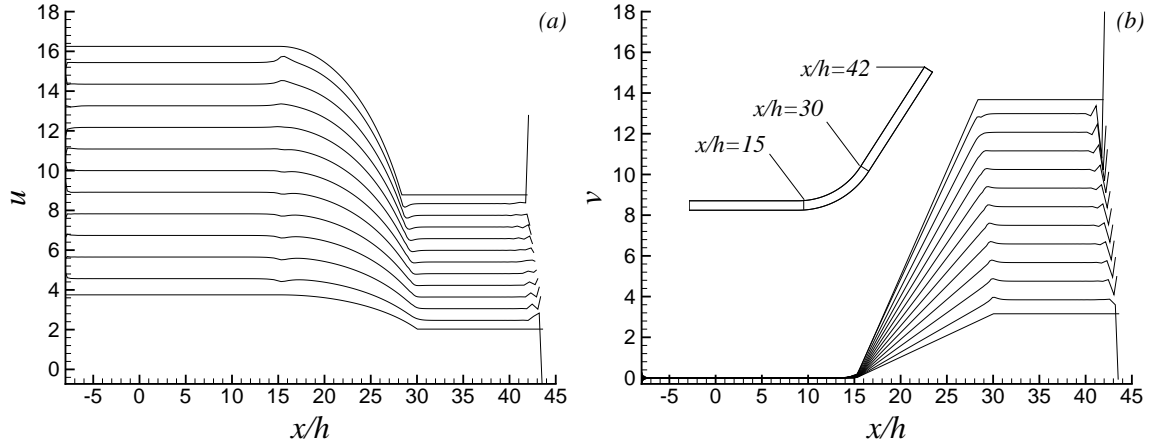


Figura A.2: Componentes u (a) e v (b) da velocidade ao longo do eixo do canal com curvatura para diversas cotas y , usando a condição-A na saída, no instante $t = 0.07$ s.

Considerando as melhorias alcançadas com a determinação local da velocidade de convecção insuficientes, resolveu-se estudar a estabilidade dos métodos numéricos utilizados estabelecendo os seguintes critérios para a convecção e para a difusão, respectivamente:

$$C_j = \left| \sum (u_i B_{ij}) \right| \frac{\Delta t}{J}, \quad (\text{A.5})$$

$$S_j = \mu \frac{\Delta t}{(\Delta x_j^2 + \Delta y_j^2 + \Delta z_j^2)}, \quad (\text{A.6})$$

onde, $i = 1, 2, 3$ e $j = \xi, \eta, \zeta$ (j representa a direcção computacional), u_i são velocidades, B_{ij} e J são os co-factores e determinante da matriz de transformação de coordenadas.

Os valores máximos dos critérios de estabilidade para as diversas condições (tabela. A.1) ocorrem na saída e não estão representados nas figuras A.4 e A.5, porque impedem a visua-

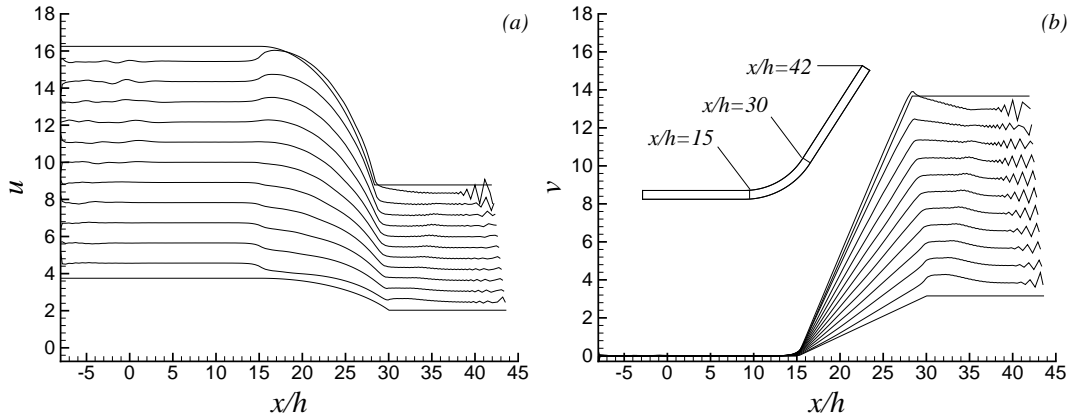


Figura A.3: Componentes u (a) e v (b) da velocidade ao longo do eixo do canal com curvatura para diversas cotas y , usando a condição-B na saída, no instante $t = 1$ s.

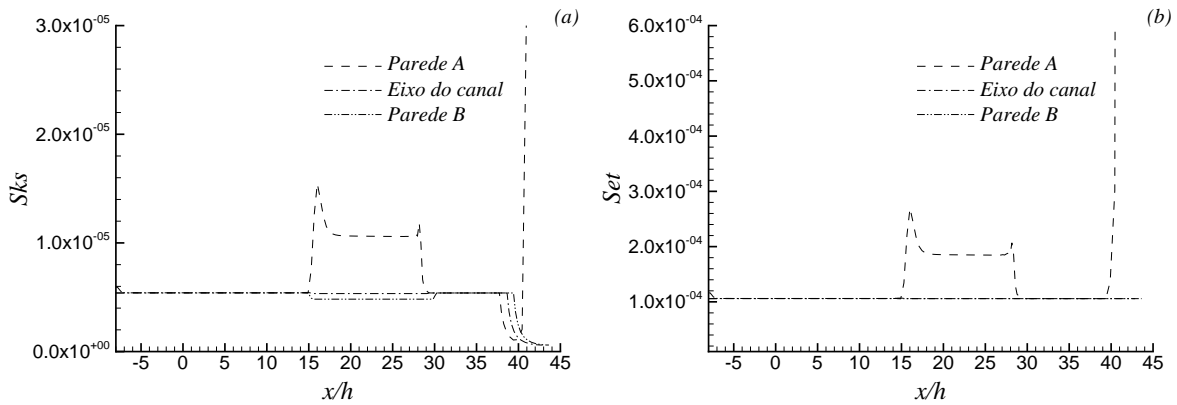


Figura A.4: Critérios de estabilidade S_j nas direcções computacionais ξ (a) e η (b), usando a condição-A na saída, no instante $t = 0.07$ s.

lização da evolução na curva ($15 < x/h < 30$), onde o critério apesar de variar tem uma evolução natural.

Podemos ver que no caso das condições C e D os indicadores C_j e S_j (A.5) e (A.6) mantêm-se baixos. A condição-B tem um S_η elevado, o que explica as oscilações da figura A.3. Note-se para o facto do valor de S_η na condição-A ser inferior ao valor para a condição-B, mas o instante de tempo é diferente pelo facto da condição-A não avançar mais do que 0.07 s. Os valores máximos do critério C_j ocorrem no eixo do canal para todas as condições e os valores máximos do critério S_j ocorrem, nas condições A e B na parede A.

Condição	S_ξ	S_η	C_ξ	C_η
A*	$1,3 \times 10^{-4}$	$2,4 \times 10^{-2}$	$8,6 \times 10^{-2}$	$4,5 \times 10^{-3}$
B	$1,0 \times 10^{-3}$	$1,8 \times 10^{-1}$	$8,2 \times 10^{-3}$	$9,6 \times 10^{-4}$
C	$6,5 \times 10^{-7}$	$1,0 \times 10^{-4}$	$8,4 \times 10^{-3}$	$2,2 \times 10^{-5}$
D	$6,4 \times 10^{-7}$	$1,0 \times 10^{-4}$	$8,5 \times 10^{-3}$	$6,4 \times 10^{-5}$

Tabela A.1: Valores máximos dos critérios de estabilidade na saída, no instante $t = 1$ s (* $t = 0.07$ s).

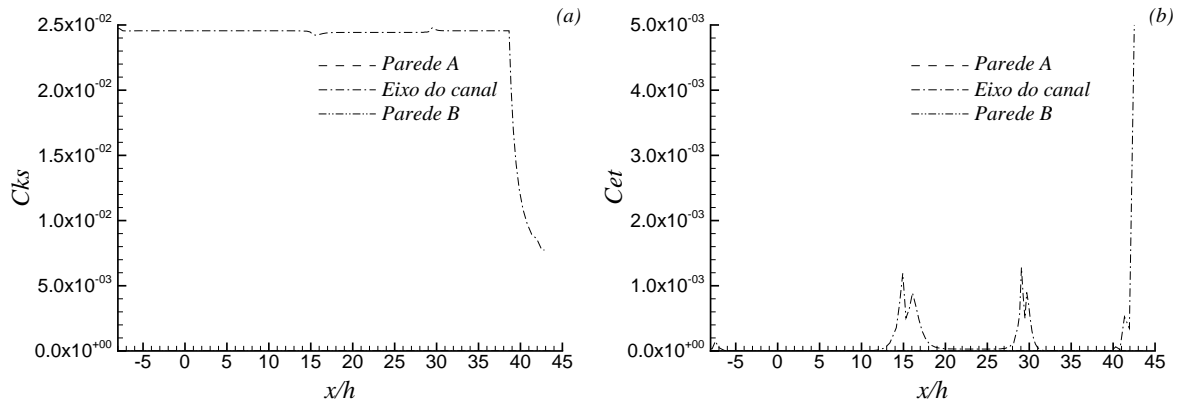


Figura A.5: Critérios de estabilidade C_j nas direcções computacionais ξ (a) e η (b), usando a condição-A na saída, no instante $t = 0.07$ s.

A.3.2 Diagramas de Estabilidade pelo Método de von Neumann

Para compreender melhor o que está na origem das oscilações dos casos A e B, considerámos a equação de convecção-difusão uni-dimensional,

$$\partial\phi/\partial t + C_\phi\partial\phi/\partial x = k\partial^2\phi/\partial x^2, \quad (\text{A.7})$$

discretizada com combinações diversas de esquemas de discretização e condições de fronteira usando Euler explícito e Runge-Kutta (2,2) para a derivada temporal, diferenças finitas atrasadas de 1ª ordem (BDS–*Backward Difference Schemes*) e diferenças finitas centrais de 2ª ordem (CDS–*Central Difference Schemes*) para a primeira e também para a segunda derivada espacial. A função transportada foi:

$$\phi_0 = \cos(1 - 12x), \quad (\text{A.8})$$

usando as condições na fronteira de saída idênticas às das simulações no canal da figura A.1a. Determinaram-se os factores de amplificação, usando o método de von Neumann, e representamos os diagramas de estabilidade na figura A.6, fazendo variar o número de Courant. As restantes condições de teste estão agrupadas na tabela A.3. A determinação

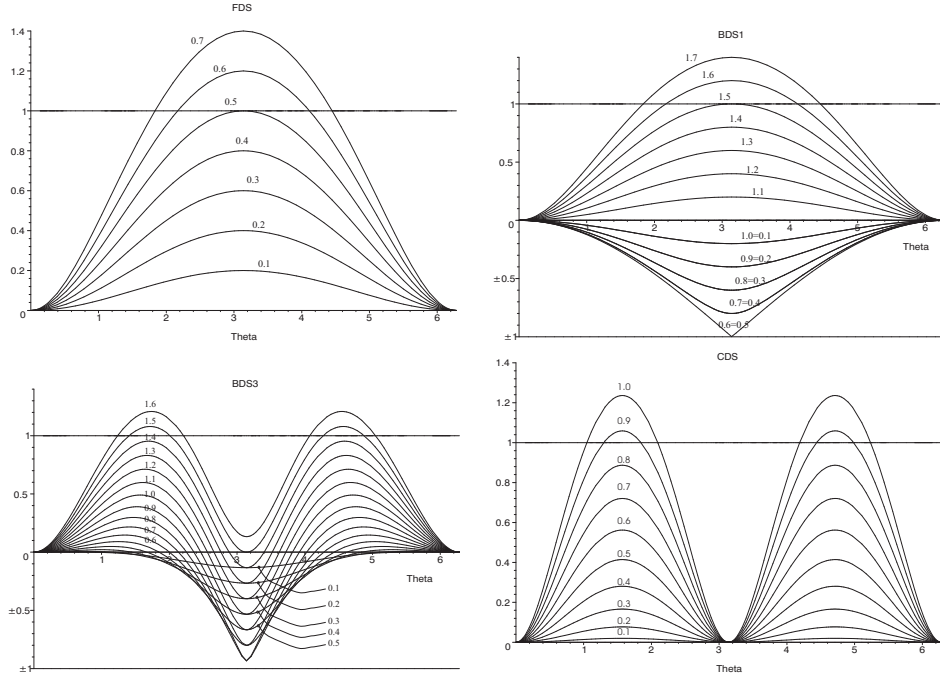


Figura A.6: Diagramas de estabilidade (factor de amplificação, G) para os diversos esquemas de discretização.

do factor de amplificação, para a equação da convecção discretizada por CDS, foi feita do seguinte modo:

$$U^{n+1}e^{i\theta j} = U^n e^{i\theta j} - \underbrace{C_\phi \frac{\Delta t}{2\Delta x}}_C [U^n e^{i\theta(j+1)} - U^n e^{i\theta(j-1)}], \quad (\text{A.9})$$

usando a relação, $\sin \theta = (e^{i\theta} - e^{-i\theta})/(2i)$, na equação (A.9), podemos escrever o factor de amplificação G ,

$$U^{n+1} = U^n \underbrace{[1 - 2Ci \sin \theta]}_G. \quad (\text{A.10})$$

A determinação dos restantes factores de amplificação foi feita de modo análogo e estes estão agrupados na tabela A.2.

Atendendo aos resultados da figura A.6, decidiu-se manter o número de Courant fixo $C = 0.5$ e igual para todos os testes efectuados. As duas situações representadas na figura A.9a, apenas diferem no esquema de discretização da primeira derivada. O transporte da função ϕ_0 é feito da esquerda para a direita e a condição na fronteira da esquerda é fixa.

Perante as condições de teste da figura A.9 mas com velocidade de convecção constante, ambos os esquemas de discretização da primeira derivada (BDS1 e CDS) não resolvem de forma adequada a condição de saída. Com determinação local da velocidade de convecção,

Condição	Factor de amplificação G
A	$1 + C(1 - \cos \theta) - iC \sin \theta$
B	$1 - C(1 - \cos \theta) + iC \sin \theta$
C	$1 - C(1/6e^{-2i\theta} - e^{-i\theta} + 1/2 + 1/3e^{i\theta})$
D	$1 - 2Ci \sin \theta$

Tabela A.2: Factores de amplificação para a equação da convecção usando a análise de von-Neumann.

Int. Temporal \Rightarrow	1 - Euler	2 - Runge-Kutta(2,2)
Outflow \Rightarrow	1 - Orlanski	2 - Gradiente nulo
Vel. convecção na saída \Rightarrow	1 - Constante	2 - Local

Tabela A.3: Condições de teste da condição de convecção-difusão uni-dimensional.

de acordo com Orlanski, e aproximando a primeira derivada por CDS (2ª ordem), o problema das oscilações não se revela, tal como mostra a figura A.9. Desta forma, é preferível discretizar a primeira derivada por CDS (2ª ordem) em vez de um esquema BDS (1ª ordem).

Na figura A.10 temos a mesma situação da figura A.9, mas reduzimos ao Δx e Δt uma ordem de grandeza mantendo o mesmo número de Courant $C = 0.5$. Verificamos que desta forma deixam de existir oscilações na saída e a solução não apresenta problemas numéricos no interior do domínio de cálculo. Isto vem confirmar outros testes efectuados com o canal onde verificamos que a malha é muito importante na resolução das oscilações na saída. Quando utilizámos a malha a expandir na direcção da saída, a condição de saída funciona melhor independentemente dos esquemas de discretização usados. Desta forma, a malha funciona como um filtro de instabilidades. Os resultados análogos aos das figuras A.9 e A.10, mas para esquemas Runge-Kutta ou Euler explícito com e sem termo difusivo são virtualmente idênticos e não foram representados.

A.3.3 Condição de Gradiente Longitudinal Nulo e de Euler Explícito

Retomou-se o problema do canal, agora com CDS de 2ª ordem, malha a expandir para a saída e Euler explícito para a condição de saída. O Euler explícito pode ser considerado como uma perda de precisão face a um esquema Runge-Kutta (4,3), mas a verdade é que nesta situação de forte gradiente de velocidade em saída inclinada a condição-C foi estável e expulsou as instabilidades geradas no interior do domínio para o exterior. A figura A.7 mostra o comportamento das componentes u e v da velocidade nesta situação ao fim de 1 s.

Também a condição-D (figura A.8, gradiente nulo de velocidade) resolve bem a fronteira

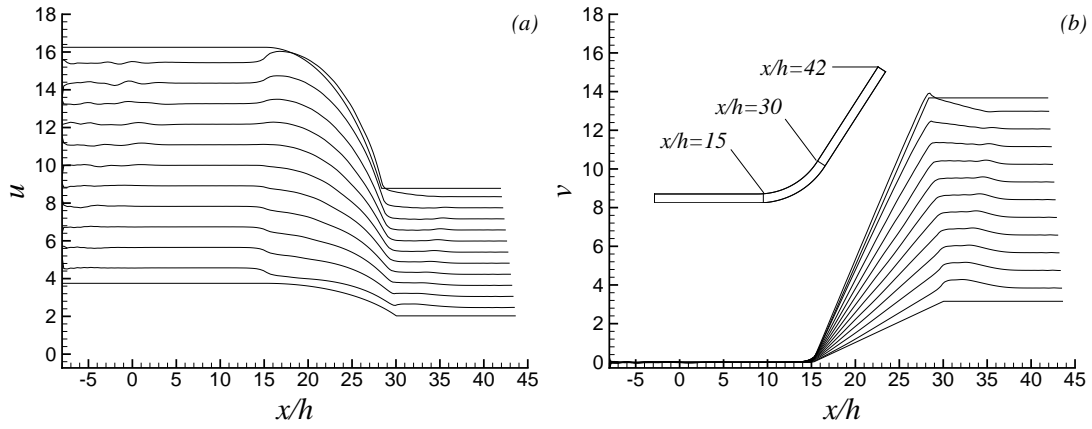


Figura A.7: Componentes u (a) e v (b) da velocidade ao longo do eixo do canal a diversas cotas y , usando a condição-C na saída.

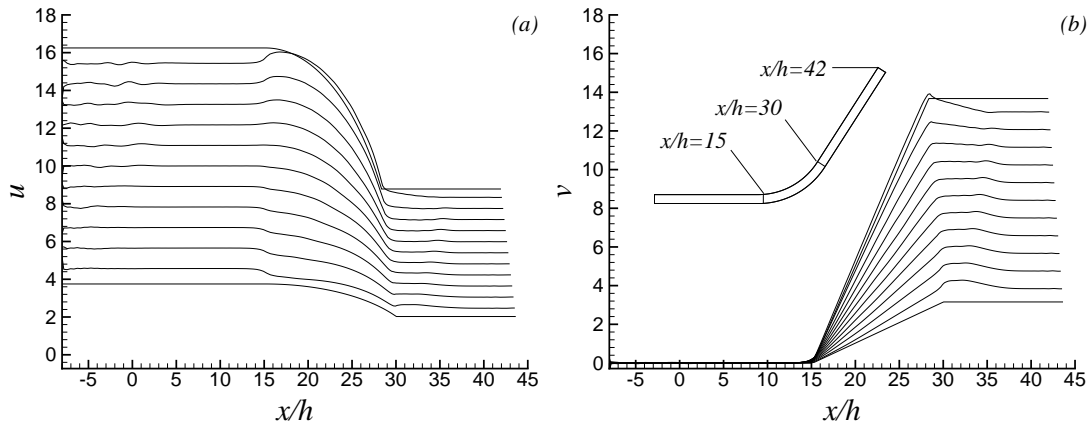


Figura A.8: Componentes u (a) e v (b) da velocidade ao longo do eixo do canal a diversas cotas y , usando a condição-D na saída.

de saída, no entanto, são visíveis pequenas oscilações na parede superior que não ocorrem no caso da condição-C. Embora em termos de estabilidade as duas condições apresentem resultados similares, a condição-C é do ponto de vista físico, uma melhor solução do que a condição-D, e portanto preferível.

Por oposição às condições A e B, o critério da equação (A.6) no caso das condições C e D não apresentava qualquer variação na saída. As figuras A.7 e A.8 confirmam a superioridade, em termos de estabilidade, das condições C e D relativamente às condições A e B.

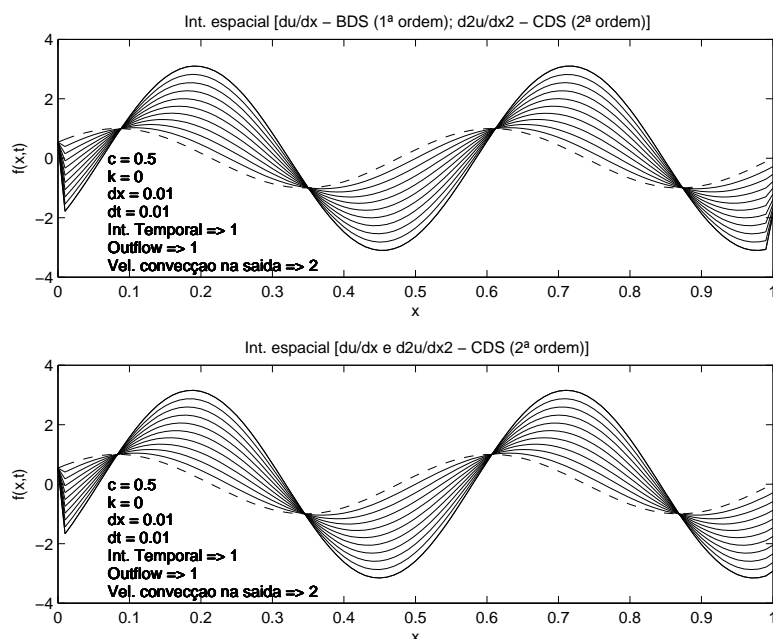


Figura A.9: Transporte de uma onda (da esquerda para a direita), com difusão numérica e saída instável/estável (ver condições de teste da tabela A.3).

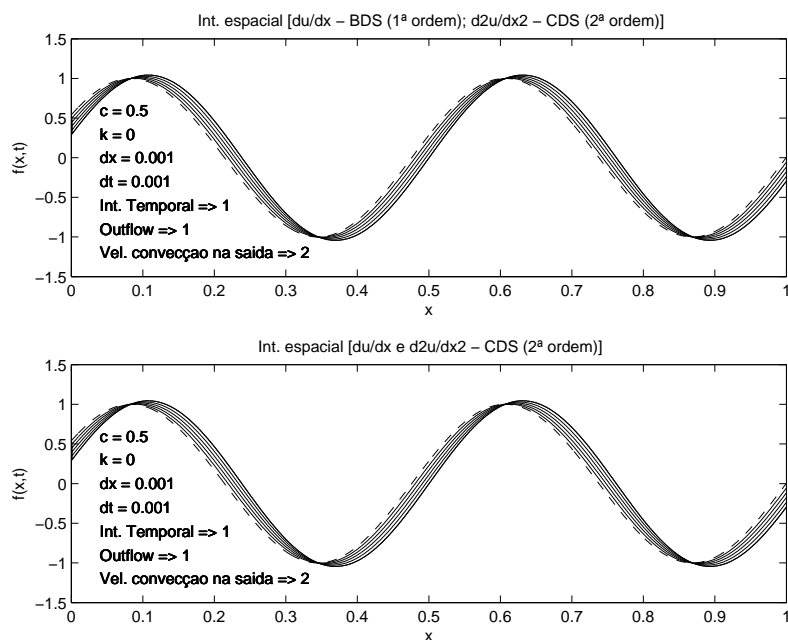


Figura A.10: Transporte de uma onda (da esquerda para a direita), sem difusão numérica e saída estável (ver condições de teste da tabela A.3).

A.4 Conclusões

Neste apêndice foi tema de estudo a condição de saída utilizada na simulação das grandes escalas da turbulência (LES) de escoamentos com complexidade geométrica na secção de saída. Depois de termos verificado que a condição convectiva de saída de Orlanski é inadequada para simular escoamentos com fortes gradientes em saídas inclinadas, procurámos alternativas que pudessem melhorar o desempenho da condição de Orlanski.

Verificou-se que, efectuando a determinação local da velocidade convectiva na condição de saída de Orlanski, foi possível melhorar a estabilidade na saída. Mostrámos ainda que esquemas de discretização mais simples, como por exemplo, Euler explícito (2ª ordem), revelaram também maior estabilidade do que esquemas de ordem superior do tipo Runge-Kutta (4,3) e que a condição de saída de gradiente nulo, do ponto de vista numérico, revelou ser tão estável como a condição de saída resolvida usando discretização por Euler explícito.

Neste trabalho verificámos também que em qualquer das condições de saída testadas, as maiores instabilidades ocorrem nas paredes (fronteiras). No caso da condição de Orlanski com determinação local da velocidade de convecção, as instabilidades são maiores onde a velocidade local é mais elevada.

Estudou-se o efeito da malha na estabilidade da condição de saída e verificámos que, usando malhas que expandem na direcção da saída (garantindo os critérios de estabilidade para a convecção e difusão) são reduzidas as instabilidades geradas, resultando um melhor desempenho de todas as condições testadas. Nesta situação a malha funciona como um filtro de instabilidades.

Apêndice B

Derivação e Adimensionalização dos Termos de Corte

Resumo do Apêndice

No presente apêndice apresentamos a derivação dos termos de corte das equações (3.2) e (3.3), os quais derivam do segundo termo da equação (3.2). Descrevemos também a adimensionalização dos referidos termos usando as escalas características do escoamento.

B.1 Derivação dos Termos de Corte

Vamos considerar o termo não-linear das equações de Navier-Stokes:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial uu}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} + \frac{\partial uw}{\partial z} \\ \frac{\partial vu}{\partial x} + \frac{\partial vv}{\partial y} + \frac{\partial vw}{\partial z} \\ \frac{\partial wu}{\partial x} + \frac{\partial wv}{\partial y} + \frac{\partial ww}{\partial z} \end{array} \right. , \quad (\text{B.1})$$

e admitir que o valor instantâneo da velocidade u_{inst} se decompõe em componente média \overline{U}_i e flutuação u_i , (decomposição de Reynolds):

$$u_{inst} = \overline{U}_i + u_i . \quad (\text{B.2})$$

Substituindo a equação (B.2) na equação (B.1), podemos constituir um sistema de equações com cada um dos termos da equação (B.1). Temos três componentes. A componente x ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x}(\bar{U} + u)(\bar{U} + u) = \frac{\partial}{\partial x}(\underbrace{\bar{U} \cdot \bar{U}}_0 + \bar{U}u + u\bar{U} + uu) = \frac{\partial}{\partial x}2u\bar{U} + \frac{\partial}{\partial x}uu \\ \frac{\partial}{\partial y}(\bar{U} + u)(\bar{V} + v) = \frac{\partial}{\partial y}(\underbrace{\bar{U} \cdot \bar{V}}_0 + \bar{U}v + \underbrace{u\bar{V}}_0 + uv) = \frac{\partial}{\partial y}v\bar{U} + \frac{\partial}{\partial y}uv \\ \frac{\partial}{\partial z}(\bar{U} + u)(\bar{W} + w) = \frac{\partial}{\partial z}(\underbrace{\bar{U} \cdot \bar{W}}_0 + \bar{U}w + \underbrace{u\bar{W}}_0 + uw) = \frac{\partial}{\partial z}w\bar{U} + \frac{\partial}{\partial z}uw \end{array} \right. , \quad (\text{B.3})$$

componente y ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x}(\bar{V} + v)(\bar{U} + u) = \frac{\partial}{\partial x}(\underbrace{\bar{V} \cdot \bar{U}}_0 + \underbrace{\bar{V}u}_0 + v\bar{U} + vu) = \frac{\partial}{\partial x}v\bar{U} + \frac{\partial}{\partial x}vu \\ \frac{\partial}{\partial y}(\bar{V} + v)(\bar{V} + v) = \frac{\partial}{\partial y}(\underbrace{\bar{V} \cdot \bar{V}}_0 + \underbrace{\bar{V}v}_0 + \underbrace{v\bar{V}}_0 + vv) = \frac{\partial}{\partial y}vv \\ \frac{\partial}{\partial z}(\bar{V} + v)(\bar{W} + w) = \frac{\partial}{\partial z}(\underbrace{\bar{V} \cdot \bar{W}}_0 + \underbrace{\bar{V}w}_0 + \underbrace{v\bar{W}}_0 + vw) = \frac{\partial}{\partial z}vw \end{array} \right. , \quad (\text{B.4})$$

e componente z ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x}(\bar{W} + w)(\bar{U} + u) = \frac{\partial}{\partial x}(\underbrace{\bar{W} \cdot \bar{U}}_0 + \underbrace{\bar{W}u}_0 + w\bar{U} + wu) = \frac{\partial}{\partial x}w\bar{U} + \frac{\partial}{\partial x}wu \\ \frac{\partial}{\partial y}(\bar{W} + w)(\bar{V} + v) = \frac{\partial}{\partial y}(\underbrace{\bar{W} \cdot \bar{V}}_0 + \underbrace{\bar{W}v}_0 + \underbrace{w\bar{V}}_0 + wv) = \frac{\partial}{\partial y}wv \\ \frac{\partial}{\partial z}(\bar{W} + w)(\bar{W} + w) = \frac{\partial}{\partial z}(\underbrace{\bar{W} \cdot \bar{W}}_0 + \underbrace{\bar{W}w}_0 + \underbrace{w\bar{W}}_0 + ww) = \frac{\partial}{\partial z}ww \end{array} \right. . \quad (\text{B.5})$$

Nos sistemas de equações (B.3), (B.4) e (B.5) os termos sem componente média constituem o termo convectivo das equações de Navier-Stokes já conhecido. Para tratar os restantes termos vamos decompor o segundo termo da primeira equação do sistema de equações (B.3) da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial x}2u\bar{U} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}u\bar{U}}_A + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}u\bar{U}}_B . \quad (\text{B.6})$$

O termo (A) da equação (B.6) e os termos dos sistemas de equações (B.4) e (B.5) constituem o primeiro termo de corte,

$$\bar{U} \frac{\partial u_i}{\partial x_1} . \quad (\text{B.7})$$

Adicionando o termo (B) da equação (B.6) aos restantes termos do sistema de equações (B.3) resulta:

$$u \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} + \bar{U} \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial \bar{U}}{\partial y} + \bar{U} \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} + \bar{U} \frac{\partial w}{\partial z} . \quad (\text{B.8})$$

Considerando que o gradiente de velocidade é nulo nas direcções x e y e agrupando os termos que constituem a equação da continuidade, podemos obter o segundo termo de corte,

$$\underbrace{u \frac{\partial \bar{U}}{\partial x}}_0 + \underbrace{v \frac{\partial \bar{U}}{\partial y}}_0 + \underbrace{\bar{U} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)}_0 + w \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} . \quad (\text{B.9})$$

De notar que este termo só existe na componente x das equações de Navier-Stokes.

B.2 Adimensionalização dos Termos de Corte

Os termos das equações (B.7) e (B.9) têm de ser adimensionalizados. Para isso começamos por definir o número de corte adimensional,

$$S = \frac{L}{\Delta U} \frac{dU}{dz} \Leftrightarrow \frac{dU}{dz} = S \frac{\Delta U}{L} . \quad (\text{B.10})$$

Integrando a equação (B.10), obtemos uma expressão para o cálculo da velocidade, U :

$$\int_0^{x_3} \frac{dU}{dx_3} dx_3 = \int_0^{x_3} S \frac{\Delta U}{L} dx_3 \Leftrightarrow U = S \frac{\Delta U}{L} x_3 . \quad (\text{B.11})$$

Substituindo a equação (B.11) na equação (B.7) e adimensionalizando a derivada da velocidade $\partial u_i / \partial x_1$ resulta:

$$\underbrace{S \frac{\Delta U}{L} x_3}_U \frac{\Delta U}{L} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_1^*} = S \frac{\Delta U^2}{L} \underbrace{\frac{x_3}{L}}_{x_3^*} \frac{\partial u_i^*}{\partial x_1^*} . \quad (\text{B.12})$$

Dividindo por $\Delta U^2/L$, à semelhança de todos os termos da equação de quantidade de movimento, a equação (B.12) reduz-se à equação (B.13), que constitui o primeiro termo de corte adimensional,

$$S x_3^* \frac{\partial u_i^*}{\partial x_1^*} . \quad (\text{B.13})$$

Procedendo de modo idêntico com o segundo termo de corte, (equação (B.9)):

$$w \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} = w^* \Delta U \frac{dU}{dz} . \quad (\text{B.14})$$

e dividindo por $\Delta U^2/L$, chegamos ao segundo termo de corte adimensional,

$$w^* \Delta U \frac{L}{\Delta U^2} \frac{dU}{dz} = w^* \underbrace{\frac{L}{\Delta U} \frac{dU}{dz}}_S = S w^* = S u_3^* . \quad (\text{B.15})$$

Bibliografia

- AGARD (1998). A selection of test cases for the validation of large-eddy simulations of turbulent flows. Technical Report AGARD-AR-345, AGARD–Advisory Group for Aerospace Research Development.
- Ahmed, P. R. B. A. (1993). Turbulent boundary layers subjected to multiple curvatures and pressure gradients. *Journal of Fluid Mechanics* 246, 503–527.
- Antonia, R. A. and P. Orlandi (2003). Effect of Schmidt number on small-scale passive scalar turbulence. *Applied Mechanics Reviews* 56(6), 615–632.
- Antonia, R. A. and P. Orlandi (2004). Similarity of decaying isotropic turbulence with a passive scalar. *Journal of Fluid Mechanics* 505, 123–151.
- Armenio, V. and U. Piomelli (2000). A Lagrangian mixed subgrid-scale model in generalized coordinates. *Flow Turbulence and Combustion* 65(1), 51–81.
- Bardina, J., J. H. Ferziger, and W. C. Reynolds (1983). Improved turbulence models based on large eddy simulation of homogeneous, incompressible, turbulent flows. Technical Report TF-19, Stanford University, Thermosciences Division, Department of Mechanical Engineering, Stanford, California, USA.
- Batchelor, G. K. (1959). Small-scale variation of convected quantities like temperature in a turbulent fluid. *Journal of Fluid Mechanics* 5, 113–133.
- Biferale, L. and F. Toschi (2001). Anisotropic homogeneous turbulence: hierarchy and intermittency of scaling exponents in the anisotropic sectors. *Physical Review Letters* 86(21), 4831–4834.
- Borgas, M. S., B. L. Sawford, S. Xu, D. A. Donzis, and P. K. Yeung (2004). High Schmidt number scalars in turbulence: Structure functions and Lagrangian theory. *Physics of Fluids* 16(11), 3888–3899.
- Bradshaw, P. (1973). Effects of streamline curvature on turbulent flow. Technical report, AGARDograph N. 169.
- Bradshaw, P. (1978). *Turbulence* (Second ed.). Berlin: Springer-Verlag.

- Carpenter, M. and C. Kennedy (1994). Four-order 2n-storage Runge-Kutta schemes. *Technical Report NASA-TM-109112*, NASA Langley Research Center.
- Celani, A., M. Cencini, M. Vergassola, E. Villiermaux, and D. Vincenzi (2005). Shear effects on passive scalar spectra. *Journal of Fluid Mechanics* 523, 99–108.
- Champagne, F. H., V. G. Harris, and S. Corrsin (1970). Experiments on nearly homogeneous turbulent shear flow. *Journal of Fluid Mechanics* 41(1), 81–139.
- Chebby, B., A. G. L. Holloway, and S. Tavoularis (1998). The response of sheared turbulence to changes in curvature. *Journal of Fluid Mechanics* 358, 223–224.
- Chollet, J. P. and M. Lesieur (1981). Parameterization of small scales of three-dimensional isotropic turbulence utilizing spectral closures. *Journal of the Atmospheric Sciences* 38, 2747–2757.
- Corrsin, S. (1951). On the spectrum of isotropic temperature fluctuations in an isotropic turbulence. *Journal of Applied Physics* 22(4), 469–473.
- Deardorff, J. W. (1970). A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics* 41, 453–480.
- Domaradzki, J. A. and E. M. Saiki (1997). A subgrid-scale model based on the estimation of unresolved scales of turbulence. *Physics of Fluids* 9, 2148–2164.
- Ecke, R. (2005). The turbulence problem: an experimentalist’s perspective. *Los Alamos Science* 29, 124–141.
- Eswaran, V. and S. B. Pope (1988). Direct numerical simulation of the turbulent mixing of a passive scalar. *Physics of Fluids* 31(3), 506–520.
- Ferziger, J. H. (1997, July 9–11). Direct and large eddy simulation: applications to complex and stratified flows. In B. J. Geurts and J. G. M. Kuerten (Eds.), *DNS and LES of Complex Flows — Numerical and Modelling Aspects*, The Netherlands, pp. 162–174. University of Twente.
- Ferziger, J. H. and M. Perić (2002). *Computational methods for fluid dynamics* (Third ed.). Berlin, Germany: Springer-Verlag.
- George, W. K. (1992). The decay of homogeneous isotropic turbulence. *Physics of Fluids* 4, 1492–1509.
- Germano, M., U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot (1991). A dynamic subgrid scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A* 3, 1760–1765.
- Gerz, T., U. Schumann, and S. E. Elghobashi (1989). Direct numerical simulation of stratified homogeneous turbulent shear flows. *Journal of Fluid Mechanics* 200, 563–594.

- Ghosal, S., T. S. Lund, P. Moin, and K. Akselvoll (1995). A dynamic localization model for large eddy simulation of turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics* 286, 229–255.
- Ghosal, S. and P. Moin (1995). The basic equations for the large eddy simulation of turbulent flows in complex geometries. *Journal of Computational Physics* 118, 24–37.
- Gibson, M. M. and C. A. Verriopoulos (1984). Turbulent boundary-layer on a mildly curved convex surface, part 2: Temperature-field measurements. *Experiments in Fluids* 2(2), 73–80.
- Givoli, D. and B. Neta (2002). High-order non-reflecting boundary scheme for time-dependent waves. *Journal of Computational Physics* 186, 24–46.
- Goutorbe, T., D. Laurence, and V. Maupu (1994). A priori test of a subgrid scale stress tensor including anisotropy and backscatter effects. In *Direct and Large-Eddy Simulation I*, pp. 121–131.
- Hoffmann, P. H., K. C. Muck, and P. Bradshaw (1985). The effect of concave surface curvature on turbulent boundary-layers. *Journal of Fluid Mechanics* 161, 371–403.
- Holloway, A. G. L. and S. Tavoularis (1992). The effects of curvature on sheared turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 273, 569–603.
- Holzer, M. and E. D. Siggia (1994). Turbulent mixing of a passive scalar. *Physics of Fluids A* 6(5), 1820–1837.
- Jordan, S. A. (1999). A large-eddy simulation methodology in generalized curvilinear coordinates. *Journal of Computational Physics* 148(2), 322–340.
- Kaltenbach, H. J., T. Gerz, and U. Schumann (1991). Transport of passive scalars in neutrally and stably stratified homogeneous shear flows. *Advances in turbulence - Springer-Verlag*, 327–334.
- Kang, H. S. and C. Meneveau (2001). Passive scalar anisotropy in a heated turbulent wake: new observations and implications for large-eddy simulations. *Journal of Fluid Mechanics* 442, 161–170.
- Keating, A., U. Piomelli, K. Bremhorst, and S. Nesic (2004). Large-eddy simulation of heat transfer downstream of a backward-facing step. *Journal of Turbulence* 5, 1–27.
- Kerr, R. M. (1985). Higher-order derivative correlations and the alignment of small-scale structures in isotropic numerical turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 153, 31–58.
- Kerr, R. M., J. A. Domaradzki, and G. Barbier (1996). Small-scale properties of nonlinear interactions and subgrid-scale energy transfer in isotropic turbulence. *Physics of Fluids* 8, 197–208.

- Kim, J. and P. Moin (1985). Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics* 59, 308–323.
- Kim, J., P. Moin, and R. Moser (1987). Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics* 177, 133–166.
- Kraichnan, R. H. (1976). Eddy viscosity in two and three dimensions. *Journal of the Atmospheric Sciences* 33, 1521–1536.
- Leonard, A. (1974). Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. *Advanced Geophysics* 18A, 237–248.
- Lesieur, M. and O. Métais (1996). New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics* 28, 45–82.
- Lilly, D. K. (1992). A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure model. *Physics of Fluids A* 4, 633–635.
- Liu, S., C. Meneveau, and J. Katz (1994). On the properties of similarity subgrid-scale models as deduced from measurements in a turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics* 275, 83–119.
- Lopes, A. S. (2000). *Simulação das grandes escalas da turbulência em geometrias complexas*. Ph. D. thesis, Universidade do Porto.
- Lopes, A. S. and J. Palma (2002). Numerical simulation of isotropic turbulence using a collocated approach and a non-orthogonal grid system. *Journal of Computational Physics* 175, 713–738.
- Lopes, A. S., U. Piomelli, and J. M. L. M. Palma (2003). Large eddy simulation of the flow in an S-duct. *AIAA 2003-0964*.
- Lopes, A. S., U. Piomelli, and J. M. L. M. Palma (2006). Large eddy simulation of the flow in an S-duct. *Journal of Turbulence* 7(11).
- Lund, T. S., W. Xiaohua, and D. Squires (1998). Generation of turbulent inflow data for spatially-developing boundary layer simulations. *Journal of Computational Physics* 140, 233–258.
- Meneveau, C., T. Lund, and W. Cabot (1996). A Lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 319, 353–385.
- Meroney, R. N. and P. Bradshaw (1975). Turbulent boundary-layer growth over a longitudinally curved surface. *AIAA Journal* 13(11), 1448–1453.
- Miller, M. J. and A. J. Thorpe (1981). Radiation conditions for the lateral boundaries of limited-area numerical models. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 107, 615–628.

- Miller, P. L. and P. E. Dimotakis (1996). Measurement of scalar power spectra in high Schmidt number turbulent jets. *Journal of Fluid Mechanics* 308, 129–146.
- Moser, R. D. and P. Moin (1987). The effects of curvature in wall-bounded turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics* 175, 479–510.
- Muck, K. C., P. H. Hoffmann, and P. Bradshaw (1985). The effect of convex surface curvature on turbulent boundary-layers. *Journal of Fluid Mechanics* 161, 347–369.
- Mydlarski, L. (2003). Mixed velocity-passive scalar statistics in high-Reynolds-number turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 475, 173–203.
- Mydlarski, L. and Z. Warhaft (1998). Passive scalar statistics in high-Péclet-number grid turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 358, 135–175.
- Obukhov, A. M. (1949). The structure of the temperature field in a turbulent flow. *Izvestiya Akademii Nauk SSSR, Seriya Geologia Geophysics* 13, 58–69.
- O’Gorman, P. A. and D. I. Pullin (2005). Effect of Schmidt number on the velocity-scalar cospectrum in isotropic turbulence with a mean scalar gradient. *Journal of Fluid Mechanics* 532, 111–140.
- Orlandi, P. (2000). *Fluid Flow Phenomena*. University of Rome, Italy: Kluwer Academic Publishers.
- Orlanski, I. (1976). A simple boundary conditions for unbounded hyperbolic flows. *Journal of Computational Physics* 21, 251–269.
- Orszag, S. A. and G. S. Patterson (1972). Numerical simulation of three-dimensional homogeneous isotropic turbulence. *Physical Review Letters* 28(2), 76.
- Overholt, M. R. and S. B. Pope (1996). Direct numerical simulation of a passive scalar with imposed mean gradient in isotropic turbulence. *Physics of Fluids* 8(11), 3128–3148.
- Piomelli, U. and E. Balaras (2002). Wall-layer models for large-eddy simulations. *Annual Review of Fluid Mechanics* 34, 349–374.
- Piomelli, U., W. H. Cabot, P. Moin, and S. Lee (1991). Subgrid-scale backscatter in turbulent and transitional flows. *Physics of Fluids A* 3, 2133–2142.
- Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press.
- Press, W. H., B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling (1993). *Numerical Recipes in FORTRAN* (Second ed.). Cambridge, United Kingdom: Cambridge University Press.

- Raymond, W. H. and H. L. Kuo (1984). A radiation boundary condition for multi-dimensional flows. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 110, 535–551.
- Reynolds, W. C. (1990). The potential and limitations of direct and large eddy simulations. In J. L. Lumley (Ed.), *Whither Turbulence? Turbulence at the Crossroads*, pp. 313–343. Berlin, Springer-Verlag, Germany.
- Sagaut, P. (2005). *Large-eddy simulation for incompressible flows - An introduction* (Third ed.). Germany: Springer-Verlag.
- Schumann, U. (1985). Algorithms for direct numerical simulation of shear-periodic turbulence. In Soubbaramayer and J. P. Boujot (Eds.), *Proceedings of the Ninth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, Berlin/Heidelberg, Germany, pp. 492–496. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany.
- Schumann, U., S. E. Elghobashi, and T. Gerz (1986). Direct simulation of stably stratified turbulent homogeneous shear flows. *Internal Report*, 245–264.
- Shraiman, B. I. and E. D. Siggia (2000). Scalar turbulence. *Nature* 405, 639–646.
- Siggia, E. D. (1981). Numerical study of small-scale intermittency in three-dimensional turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 107, 375.
- Smagorinsky, J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations, part I: the basic experiment. *Monthly Weather Review* 91, 99–165.
- So, R. M. C. and G. L. Mellor (1973). Experiment on convex curvature effects in turbulent boundary-layers. *Journal of Fluid Mechanics* 60(AUG21), 43–62.
- So, R. M. C. and G. L. Mellor (1975). Experiment on turbulent boundary-layers on a concave wall. *Aeronautical Quarterly* 26(FEB), 25–40.
- Sreenivasan, K. R., R. A. Antonia, and D. Britz (1979). Local isotropy and large structures in a heated turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics* 94, 745–775.
- Tennekes, H. and J. L. Lumley (1999). *A first course in turbulence*. Cambridge, USA: The MIT Press.
- Toro, E. F. (1999). *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics* (Second ed.). Berlin Germany: Springer-Verlag.
- Warhaft, Z. (2000). Passive scalars in turbulent flows. *Annual Review of Fluid Mechanics* 32, 203–240.
- Yeung, P. K. and S. B. Pope (1989). Lagrangian statistics from direct numerical simulation of isotropic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics* 207, 531–586.

-
- Yeung, P. K., S. Y. Xu, and K. R. Sreenivasan (2002). Schmidt number effects on turbulent transport with uniform mean scalar gradient. *Physics of Fluids* 14(12), 4178–4191.
- Zhang, Y., R. L. Street, and J. R. Koseff (1993). A dynamic mixed subgrid scale-model and its application to turbulent recirculating flows. *Physics of Fluids A* 5, 3186–3196.